

FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH GmbH
Zentralinstitut für Angewandte Mathematik
D-52425 Jülich, Tel. (02461) 61-6402

Interner Bericht

**Parameteridentifikation
für Batteriegitterwachstum
bei Korrosion**

Markus Meier

FZJ-ZAM-IB-2005-05

Juni 2005

(letzte Änderung: 06.07.2005)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Grundlagen	4
2.1	Motivation der FEM	4
2.2	Das Finite Element Netz	5
2.3	Berechnung der Verschiebungen	5
2.4	Elementtypen	6
2.5	Symmetrie	7
2.6	Berechnung der Spannungen	7
2.7	Plastizität	9
3	Erstellen des Modells	11
3.1	Einleitung	11
3.2	Netzgenerierung	12
3.3	Aufbringen der Temperaturlast	13
3.4	Materialparameter	14
4	Parameter-Identifikation	15
4.1	Beschreibung des Verfahrens	15
4.2	Das Simplexverfahren	16
4.3	Das Konjugierte-Gradienten Verfahren	20
5	Auswertung	25
5.1	Einleitung	25
5.2	Elastisches Modell	26
5.2.1	Simplexverfahren	26
5.2.2	Konjugierte-Gradienten Verfahren	27
5.3	Plastisches Modell (nur Simplexverfahren)	29
5.4	Interpretation	31
6	Zusammenfassung und Ausblick	32
A	Eingesetzte Hard- / Software	34
A.1	Genutzte Computer	34
A.1.1	Zampano	34
A.1.2	Jump	34
A.2	Software	34
A.2.1	Felix	34
A.2.2	PERMAS	35
A.2.3	RAPS	35
A.2.4	NagC-Bibliothek	35

Abbildungsverzeichnis

2.1	Die Permas-Elementtypen HEXE8, HEXE20 und HEXE27	7
2.2	dreidimensionaler Spannungszustand	8
2.3	Spannungs-Dehnungs-Diagramm der bilinearen Approximation mit Verfestigung .	9
3.1	Versuchsaufbau	11
3.2	Messstrecken	12
3.3	Abmessungen des Originalbatteriegitter, Dicke $d=0,943\text{mm}$	13
3.4	Gitteraufbau	13
4.1	Ablaufplan	15
4.2	Erstellung des Schwerpunktes \bar{x} und des Testpunktes x_r ($\alpha = 1$)	17
4.3	Spiegelung (1. mit $\alpha = 1$)	18
4.4	Expansion mit $F_e < F_r$ (2. mit $\beta = 2$)	18
4.5	Äußere Kontraktion (3.i. mit $\gamma = 0,5$)	19
4.6	Innere Kontraktion (3.ii., $\gamma = 0,5$)	19
4.7	Verkleinerung des Simplexes ($\delta = 0,5$)	19
4.8	Verfahren des steilsten Abstiegs sowie das Konjugierte-Gradienten Verfahren . . .	20
5.1	Temperaturverteilung nach dem Simplexverfahren (elastisches Modell)	27
5.2	Verformtes Gitter nach dem Simplexverfahren (elastisches Modell) 2,55-fach überhöht	28
5.3	Temperaturverteilung von Simplex- (hell) und CG-Verfahren (dunkel)	29
5.4	Temperaturverteilung von Simplexverfahren nach dem plastischen Modell	30
5.5	Korrosionsgrade	31

Tabellenverzeichnis

3.1	Einheiten der Parameter a_i	13
5.1	Absolutes Wachstum Probe 1273 nach 10 Tagen, [14]	25
5.2	Dehnungen mit optimaler Temperaturverteilung nach Simplexverfahren (elastisches Modell)	27
5.3	Schrittweiten für die Berechnung der partiellen Ableitungen mittels Differenzenquotienten mit wie in Tabelle 3.1 dargestellten Einheiten	28
5.4	Dehnungen mit optimaler Temperaturverteilung nach Simplexverfahren (plastisches Modell)	30
A.1	Zeitaufwand Zampano	34
B.1	Materialkenndaten für das elastische Modell	36
B.2	Materialkenndaten für das plastische Modell mit linearer Verfestigung	36

Zusammenfassung

Die numerische Simulation naturwissenschaftlicher und technischer Problemstellungen ermöglicht es, viele Entwicklungsprozesse schneller und billiger durchzuführen. Die Fragestellung wird dazu mit Hilfe mathematischer Modelle beschrieben, die oft auf (partiellen) Differentialgleichungen basieren. Die Finite Elemente Methode (FEM) wurde zur praktischen Berechnung solcher Modelle entwickelt. Bei der FEM wird das kontinuierliche Problem durch ein System mit einer endlichen Anzahl von Freiheitsgraden ersetzt. Durch den Einsatz moderner Rechner stellt auch die Untersuchung großer Systeme kein Problem mehr dar.

Die vorliegende Diplomarbeit beschäftigt sich mit der Parameteridentifikation für Batteriegitterwachstum bei Korrosion. Um das Wachstum durch Korrosion, d.h. die Reaktion des aus Blei gefertigten Batteriegitters mit der umgebenden Schwefelsäure, zu simulieren, werden beim Batteriegitter drei Schichten (Bleiodioxid - Blei - Bleiodioxid) unterschieden. Die Oxidschichten sind durch Korrosion entstanden und verursachen die Verformung, genauer das Wachstum des Batteriegitters.

Dieser chemische Prozess wird in dieser Arbeit durch das Aufbringen von Temperaturalasten auf die Oxidschichten und die entsprechenden Dehnungen modelliert. Die Bleischicht wird durch das Wachstum der Oxidschichten verformt. Die Aufgabe ist dann, die (fiktiven) Temperaturverteilungen zu ermitteln, die die komplexen Verformungsmuster realer Batteriegitter in Experimenten reproduzieren. Es gilt also die Parameter einer optimalen Temperaturverteilung zu bestimmen. Dafür werden hier das Simplexverfahren (nach Nelder und Mead) und das Konjugierte-Gradienten-Verfahren benutzt.

Abstract

The numerical simulation of scientific and technical problems allows to carry out development processes faster and more cost effective. In order to achieve this the problem is described by means of mathematical models which are often based on (partial) differential equations. The finite element method (FEM) was developed for the treatment of such models. Within the FEM the continuous problem is replaced by a system with a finite number of degrees of freedom. Using modern computers even the calculation of large problems is feasible.

This diploma thesis deals with the parameter identification for the growth of battery grids undergoing corrosion. In order to simulate the growth during corrosion, i.e. the reaction of the battery grid made of lead with the surrounding sulphuric acid, the battery grid is separated into three different layers: lead dioxide - lead - lead dioxide. The oxide layers generated by the corrosion are responsible for the deformation more precisely the growth of the battery grid.

Within this thesis this chemical process is modelled by applying temperature loads and the corresponding strains to the oxide layers. The lead layer is deformed consequently by the growth of the oxide. The essential task is to find the (fictitious) temperature distribution which reproduces the complex deformation pattern observed with real battery grids in experiments. In other words it is necessary to determine the parameters of an optimal temperature distribution. This is achieved here using the simplex algorithm (of Nelder and Mead) and the conjugate gradient method.

Kapitel 1

Einleitung

Die Finite Element Methode (FEM) ist das wohl meist eingesetzte numerische Berechnungsverfahren für Feldprobleme und damit für eine Vielzahl technischer und physikalischer Problemstellungen. Verwendung findet die Finite Element Methode nicht nur in „klassischen“, sondern auch in „neuen“ Aufgabenstellungen. Zu den „klassischen“ Anwendungen gehören Verformungen von Bauteilen unter Belastung (z.B. Automobilbau, Bauingenieurwesen), Schwingungen von Strukturen, Wärmeleitung in festen Körpern oder Strömungsmechanik (Luft- und Raumfahrt). Neu hinzugekommene Einsatzgebiete sind u.a. die Medizintechnik und die Geophysik. Die idealisierten Problemstellungen werden mathematisch in der Regel durch partielle Differentialgleichungen beschrieben. Die Komplexität solcher Differentialgleichungen macht eine Herleitung von analytischen Lösungen meist unmöglich. Man ist deshalb auf numerische Näherungsverfahren angewiesen, die jedoch auf fast beliebig komplexe Problemstellungen angewendet werden können. Eine kurze Einführung in die FEM wird in Kapitel 2 gegeben.

Diese Diplomarbeit beschäftigt sich mit der Parameteridentifikation für Batteriegitteerwachstum bei Korrosion. Die Korrosion der aus Blei bestehenden Gitter entsteht durch eine elektrochemische Reaktion mit Schwefelsäure. Dabei bilden sich um das von der Firma DSL in Dresden hergestellte Batteriegitte zwei Oxidschichten, die das Blei einschließen. Die Oxidschichten dehnen sich in alle drei Koordinatenrichtungen aus. Durch die feste Verbindung mit den Oxidschichten erfährt auch die Bleischicht sichtbare Verformungen.

Es wird ein FEM-Modell vorgestellt, welches die Verformungen des Batteriegitte durch Korrosion beschreiben soll. Dies geschieht durch eine Temperaturänderung der äußeren FEM-Schichten, die eine entsprechende Volumenänderung hervorruft. Durch die feste Verbindung der Blei- und Oxidschichten wird auch die innere Bleischicht verformt. Die Aufgabe ist dann, die Temperaturverteilung zu finden, die die Belastungen und Verformungen hervorruft, wie sie reale Batteriegitte im Experiment zeigen. Eine detaillierte Beschreibung des Modells findet man in Kapitel 3.

In Kapitel 4 wird ein Programm vorgestellt, welches die Parameter der optimalen Temperaturverteilung identifiziert. Dies geschieht durch den Vergleich der Dehnungen von neun Messstrecken aus dem Experiment mit den Dehnungen der Modell-Rechnung. Um die Abweichung zwischen Experiment und Modell zu minimieren werden zwei Algorithmen benutzt, das Simplexverfahren (nach Nelder und Mead, Kapitel 4.2) und das Konjugierte-Gradienten Verfahren (Kapitel 4.3).

Die Ergebnisse der Modell-Rechnungen werden in Kapitel 5 vorgestellt. Die verschiedenen Temperaturverteilungen werden dargestellt und miteinander verglichen.

In Kapitel 6 werden die Ergebnisse zusammengefasst und ein Ausblick auf noch zu untersuchende Fragestellungen gegeben.

Kapitel 2

Grundlagen

2.1 Motivation der FEM

In Industrie und Forschung entstehen bei der Entwicklung von Bauteilen, Werkstücken oder Konstruktionen eine Vielzahl an Problemen. Einerseits wird eine gewisse Sicherheit und Verfügbarkeit während der gesamten Betriebszeit gefordert, andererseits steht heutzutage die Wirtschaftlichkeit solcher Konstruktionen im Vordergrund, d.h. eine kostengünstige Entwicklung ist unumgänglich.

Um Beanspruchung von Bauteilformen analytisch berechnen zu können, müssen komplex gestaltete und belastete Bauteile stark vereinfacht werden. Die Übertragung der Ergebnisse des vereinfachten Modells auf das komplexe Bauteil ist allerdings sehr fragwürdig. Um solche Ergebnisse abzusichern, müssen zeitaufwändige und kostspielige Prototypen gebaut werden, um die Ergebnisse durch Versuche zu untermauern.

Durch den Einsatz numerischer Berechnungsverfahren können der Zeit- und Kostenaufwand drastisch gesenkt werden. Hierbei werden beliebig geformte Bauteile modelliert, indem man sie in einfache, berechenbare Teilkörper zerlegt und die Berechnungen für die einzelnen Teilkörper durchführt (Diskretisierung). Unter Berücksichtigung der Rand- und Übergangsbedingungen werden die Teilkörper wieder zum Gesamtbauteil zusammengesetzt. Es entsteht ein Eigenwertproblem oder Lineares Gleichungssystem, welches je nach Anforderung der Genauigkeit und Komplexität des Bauteils eine Unbekanntenanzahl in Millionenhöhe erreichen kann. Diese Art der Simulation wird Finite Element Methode (FEM) genannt und hat ihren Ursprung Anfang der 60er Jahre in der Luft- und Raumfahrt und im Bauwesen. Vor allen in diesen zwei Arbeitsgebieten ist der Bau von 1:1-Prototypen sehr zeitaufwendig und teuer, wenn nicht undurchführbar. Auch standen zu dieser Zeit erstmals leistungsfähigere Rechner zur Verfügung, die zur numerischen Berechnung solcher großer Gleichungssysteme fähig waren.

Heutzutage ist die Finite Element Methode ein bewährtes Werkzeug in der Entwicklung solcher „klassischer“, aber auch anderer Problemstellungen. Es sind Berechnungen bei linearem und nichtlinearem Werkstoffverhalten möglich. Dabei können beispielsweise Verformungen, Spannungen, Eigenfrequenzberechnungen, sowie auch andere Feldprobleme aller Art (Temperaturfelder, magnetische/elektrische Felder usw.) berechnet werden. Je nach Problemstellung sind aufgabenspezifische Elemente erforderlich. So benötigt man für Verformungs- und Spannungsberechnungen Elemente, die E-Modul und Querkontraktionszahl beinhalten. Für Temperaturfeldberechnungen werden dagegen Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität benötigt. Die im Folgenden beschriebene kurze Einführung in die FEM basiert auf [1], [2], [3] und [4]

2.2 Das Finite Element Netz

Der erste Schritt in der Finiten-Element-Analyse ist das Aufstellen des endlich-dimensionalen (finiten) Ersatzproblems. Hierbei wird das Bauteil in einfache Teilkörper zerlegt, d.h. krumme Flächen/Linien werden stückweise definiert. Dieser Übergang wird als Diskretisierungsprozess bezeichnet und ist für numerische Berechnungen mit Hilfe von Computern notwendig. Im Zweidimensionalen entsteht dabei ein Gebiet aus Dreiecken/Vierecken etc.. Tetraeder/Hexaeder sind häufig vorkommende Elemente bei der Diskretisierung eines dreidimensionalen Problems.

Die Lösung der bekannten Differentialgleichung des kontinuierlichen Problems (Randwertproblem) werden durch Ansatz- bzw. Formfunktionen angenähert. Jedes Element hat eine eigene Ansatz- bzw. Formfunktion deren Stützstellen Gitterpunkte, die sogenannten Knoten, bilden. Alle Berechnungsgrößen werden durch die Knoten berechnet, bei Festigkeitsproblemen beispielsweise Verschiebungen und Kräfte. Es entsteht für jedes einzelne Element ein Gleichungssystem für die in diesem Element befindlichen Knoten. Die so entstandenen Gleichungssysteme werden zu einem globalen Gleichungssystem zusammengesetzt, welches unter Hinzunahme der Randbedingungen gelöst werden kann. Man erhält damit die Verschiebungen und Kräfte aller Knoten und somit die Verformung des Gesamtkörpers.

Abhängig von der Güte des entstandenen Netzes (Kapitel 3.2) und der geforderten Genauigkeit muss eine bessere Diskretisierung vorgenommen werden. Eine Möglichkeit ist es mehr, also kleinere, Elemente bei der Zerlegung des Gesamtproblems zu erzeugen. Die andere Möglichkeit besteht darin, einen höheren Grad der Ansatz- bzw. Formfunktionen zu wählen. In beiden Fällen entstehen bei der Diskretisierung mehr Knoten und durch das dadurch entstandene größere Gleichungssystem auch ein höherer Rechenaufwand.

2.3 Berechnung der Verschiebungen

Für die Berechnung der Deformation eines Körpers reicht es bei der Finiten Element Methode aus, die Verschiebungen an den einzelnen Knoten zu kennen. Die Verschiebungen anderer Punkte eines Elementes werden durch die Verschiebungen der Knoten mit Hilfe der Ansatz- bzw. Formfunktionen interpoliert. Im Folgenden werde ich mich auf den zweidimensionalen Fall beschränken. Dann ist

$$\mathbf{u} = \mathbf{N}\mathbf{d} \quad (2.1)$$

$$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & \dots \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \\ u_2 \\ v_2 \\ \dots \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

wobei $\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, y)$ der Verschiebungsvektor eines beliebigen Punktes, $\mathbf{N} = \mathbf{N}(x, y)$ die Ansatz- bzw. Formfunktion und \mathbf{d} der Verschiebungsvektor der Knoten (x_i, y_i) ist. \mathbf{N} wird so konstruiert, dass gilt

$$N_i(x_j, y_j) = \begin{cases} 1, & \text{für } i = j \\ 0, & \text{für } i \neq j. \end{cases} \quad (2.3)$$

Für die Berechnungen der Verschiebungen der Knoten wird für jedes Element folgendes Gleichungssystem aufgestellt

$$\mathbf{k}_i \mathbf{d}_i = \mathbf{f}_i, \quad (2.4)$$

wobei \mathbf{f}_i und \mathbf{d}_i der Kraftvektor des Elementes bzw. der Verschiebungsvektor der Knoten des Elementes ist. \mathbf{k}_i beschreibt die Elementsteifigkeitsmatrix und wird folgendermaßen berechnet

$$\mathbf{k}_i = \int_V (\mathbf{B}^T \mathbf{E} \mathbf{B}) dV. \quad (2.5)$$

Dabei ist \mathbf{B} die Verzerrungs-Verschiebungsmatrix und \mathbf{E} die Elastizitätsmatrix. Eine genaue Herleitung der Gleichungen (2.4) und (2.5) ist in [1] gegeben.

Im Zweidimensionalen sind \mathbf{B} und \mathbf{E} durch

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & \dots \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & \dots \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

$$\mathbf{E} = \frac{E}{1 - \nu^2} \begin{pmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

gegeben. Im ebenen Spannungszustand ist E der Elastizitätsmodul und ν die Querkontraktionszahl. Durch Überlagerung der Gleichungen (2.4) und Setzen der Randbedingungen erhält man das zu lösende globale Gleichungssystem

$$\mathbf{K} \mathbf{d} = \mathbf{f}. \quad (2.8)$$

Das Setzen der kinematischen Randbedingungen ist zwingend erforderlich, da sich ohne diese das Modell frei bewegen könnte (Starrkörperbewegung) und die globale Steifigkeitsmatrix \mathbf{K} singulär wäre. Die Anzahl der zu setzenden Randbedingungen hängt von den Freiheitsgraden des starren Körpers ab. Im Eindimensionalen reicht es aus, einen Knoten zu fesseln, um eine Starrkörperbewegung zu unterbinden. Im Höherdimensionalen muss zusätzlich die Rotationsbewegung um diesen Knoten verhindert werden.

2.4 Elementtypen

In der Finiten Element Methode gibt es eine Vielzahl verschiedener Elemente. Die FEM-Systeme bieten in Elementbibliotheken unterschiedlichste Elementtypen an, aus denen der Benutzer nur noch das für seine Aufgabe am besten geeignete Element auswählen muss. Der Benutzer muss dabei allerdings wissen, welches Element das gestellte Problem am besten löst. Es gibt für jede Dimension einige wenige Standardelemente. Im Eindimensionalen beispielsweise ist es der Stab oder der Balken, im Zweidimensionalen sind es Scheiben, Platten oder Schalen. Alle diese Elemente unterscheiden sich durch ihre Anzahl an Freiheitsgraden (DOF: degree of freedom) pro Knoten. Während der Stab im lokalen Koordinatensystem nur einen Verschiebungsfreiheitsgrad hat, besitzt der Balken zusätzliche Drehfreiheitsgrade pro Knoten.

Im dreidimensionalen Bereich werden hauptsächlich Tetraeder- oder auch Quaderelemente verwendet. Die Volumenelemente haben üblicherweise die drei translatorischen Freiheitsgrade.

Außer der Geometrie muss der Benutzer auch den Verschiebungsansatz wählen. Dieser beschreibt über die Ansatz- und Formfunktion die Verformungsgesetzmäßigkeiten im Element. Ein linearer Verschiebungsansatz bedeutet, dass sich das Element linear, also geradlinig verformen kann. Dieser Ansatz bewirkt eine konstante Dehnung (erste Ableitung der Verformung) und damit auch konstante Spannung innerhalb eines Elementes. Quadratische Verformungsansätze führen dazu, dass sich das Element gemäß eines quadratischen Polynoms verformt und einen linearen Spannungsverlauf im Element liefert. Biegeverformungen von Bauteilen lassen sich mit kubischen Verformungsansätzen erfassen. Die Berechnung von Elementen mit höheren Ansätzen benötigt zwar eine sehr viel größere Berechnungszeit, da aber ein Netz mit höherwertigen Elementen oft wesentlich gröber als ein Netz mit einfachen Elementen sein darf, ist unter Umständen insgesamt weniger Aufwand erforderlich.

In PERMAS, dem in dieser Diplomarbeit verwendeten FEM-System (Kapitel A.2.2), gibt es zahlreiche Elemente. Hier nur kurz drei verschiedene quaderförmige Elemente (HEXE8, HEXE20 und HEXE27) mit jeweils 8, 20 und 27 Knoten (Abbildung 2.1).

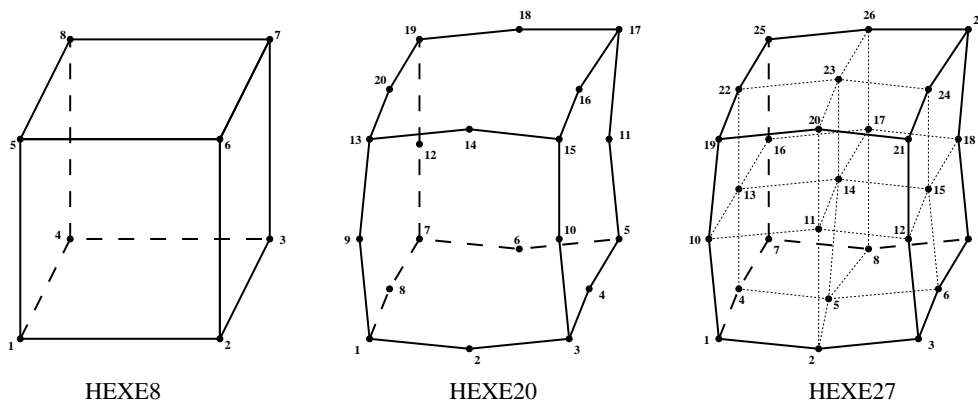


Abbildung 2.1: Die Permas-Elementtypen HEXE8, HEXE20 und HEXE27

Das HEXE8-Element bietet einen linearen Verformungsansatz und auf jedem Eckpunkt einen Knoten. Das HEXE20-Element besitzt darüberhinaus auf jeder der 12 Kanten einen Zwischenknoten und hat einen unvollständig (serendipity) quadratischen Verformungsansatz. Einen vollständig quadratischen Verschiebungsansatz hat das HEXE27-Element mit sieben weiteren Knoten auf den Außenflächen- und dem Volumenmittelpunkt.

2.5 Symmetrie

Das Ausnutzen von Symmetrieeigenschaften des Problems, wie beispielsweise Achsen- oder Punktsymmetrie, aber auch Rotations- und Translationssymmetrie, spielt eine große Rolle in der Finiten Element Methode.

Liegt eine Symmetrieeigenschaft im Modell vor, so kann der Aufwand (CPU-Zeit, Speicherbedarf) zum Lösen des Problems reduziert werden. Die Knoten in der Symmetrieebene müssen dabei mit entsprechenden Randbedingungen definiert werden. Es sollte also das Modell auf evtl. Symmetrieeigenschaften untersucht werden.

Das Prüfen der Symmetrieeigenschaft für das in dieser Arbeit untersuchte Modell wird in Kapitel 3.3 dargestellt.

2.6 Berechnung der Spannungen

Bei durch äußere Kräfte beanspruchten Körpern treten sichtbare Verformungen auf. Häufig ist man aber bei Belastung von Bauteilen nicht nur an den Verformungen interessiert, vielmehr interessiert auch die Bruchfestigkeit der Struktur. Verantwortlich für das Zerbrechen eines Körpers sind die

inneren Flächenkräfte, die Spannungen. Man ist also auch an der maximal auftretenden Spannung interessiert, mit deren Hilfe man eine Vorhersage der Sicherheitsreserve treffen kann.

Die an einer bestimmten Stelle wirkenden Spannungen werden durch die Spannungen in drei Schnittflächen beschrieben, die sich an der Stelle kreuzen. Diese drei Vektoren mit je drei Komponenten bilden zusammen den Spannungstensor \mathbf{S} in 3D

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Die Bedeutung des Spannungstensors zeigt folgende Abbildung (2.2) eines herausgeschnittenen sehr kleinen Volumenelementes.

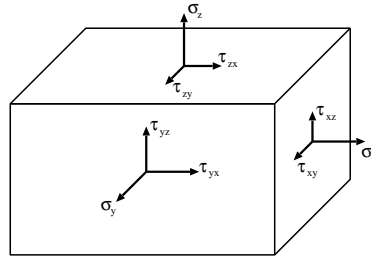


Abbildung 2.2: dreidimensionaler Spannungszustand

Die σ_i ($i = x, y, z$) beschreiben die Normalspannungen, also Spannungen, die durch senkrecht zur Fläche auftretenden Kräfte entstehen. Die Schubspannungen τ_{ij} wirken durch tangential zur Fläche auftretenden Kräfte.

Durch die Knotenverschiebungen (Kapitel 2.3) kann die Seitenlängenänderung $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$ der Elemente errechnet werden. Damit ermittelt man die Dehnungen ε und Winkeländerungen γ .

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \varepsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \varepsilon_z = \frac{\partial w}{\partial z} \quad (2.10)$$

$$\gamma_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} = \gamma_{yx}, \quad \dots \quad (2.11)$$

Mit dem Hookeschen Gesetz, welches besagt, dass eine elastische Deformation proportional zur anliegenden Spannung ist, kann der Spannungstensor für isotropes Material bestimmt werden (mit Temperaturdifferenz ΔT):

$$\varepsilon_x = \frac{1}{E}(\sigma_x - \nu(\sigma_y + \sigma_z)) + \alpha \Delta T$$

$$\varepsilon_y = \frac{1}{E}(\sigma_y - \nu(\sigma_z + \sigma_x)) + \alpha \Delta T$$

$$\varepsilon_z = \frac{1}{E}(\sigma_z - \nu(\sigma_x + \sigma_y)) + \alpha \Delta T$$

$$\gamma_{xy} = \frac{2(1 + \nu)}{E} \tau_{xy}, \quad \dots$$

wobei E der Elastizitätsmodul, ν die Querkontraktionszahl und α_T der Wärmeausdehnungskoeffizient ist.

Durch Umstellen des Hookeschen Gesetzes bekommt man Gleichungen für Normal- und Schubspannungen

$$\begin{aligned}\sigma_x &= \frac{E}{1+\nu}(\varepsilon_x + \frac{\nu}{1-2\nu}(\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z)) - \frac{E\alpha}{1-2\nu}\Delta T \\ \sigma_y &= \frac{E}{1+\nu}(\varepsilon_y + \frac{\nu}{1-2\nu}(\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z)) - \frac{E\alpha}{1-2\nu}\Delta T \\ \sigma_z &= \frac{E}{1+\nu}(\varepsilon_z + \frac{\nu}{1-2\nu}(\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z)) - \frac{E\alpha}{1-2\nu}\Delta T \\ \tau_{xy} &= \frac{E}{2(1+\nu)}\gamma_{xy}, \quad \dots\end{aligned}$$

oder mit Einheitstensor \mathbf{I} und doppelter Überschiebung:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{E} : \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{E\alpha}{1-2\nu}\Delta T \mathbf{I},$$

wobei $\boldsymbol{\sigma}$ der Spannungs-, \mathbf{E} der Elastizitäts- und $\boldsymbol{\varepsilon}$ der Dehnungstensor ist.

Für mehrachsige Beanspruchung stehen keine zulässigen Grenzwerte für die Festigkeitsberechnungen zur Verfügung. Desweiteren ist es nicht möglich aus dem Versagen bei einachsiger Belastung auf das Verhalten bei mehrachsiger Beanspruchung zu schließen. Eine Möglichkeit um trotzdem eine Aussage über die Beanspruchung des Materials machen zu können, gibt die Vergleichsspannung σ_v nach **von Mises** (Gestaltänderungsenergie) an

$$\sigma_v = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 - \sigma_x\sigma_y - \sigma_x\sigma_z - \sigma_y\sigma_z + 3(\tau_{xy}^2 + \tau_{xz}^2 + \tau_{yz}^2)}.$$

Mit dieser Metrik lassen sich Vergleiche zwischen Bauteilbeanspruchungen und Werkstoffkennwerten machen.

2.7 Plastizität

Eine reversible, also eine umkehrbare oder nicht dauerhafte, Verformung nennt man elastische Verformung. Überschreiten aufgebrachte Lasten (bzw. Deformationen) allerdings eine bestimmte Größe, bleiben irreversible, also dauerhafte, Verformungen zurück. Für die rechnerische Bearbeitung von Festigkeitsproblemen ist es erforderlich, das Spannungs-Dehnungsverhalten durch mathematische Funktionen zu erfassen. In der linearen Elastizität ist das wegen der linearen Abhängigkeit von Spannung und Dehnung kein Problem. Im Bereich der Plastizität ist allerdings ein nichtlineares Modell des Werkstoffverhaltens mit Unterscheidung der Fälle Be-, Entlastung und neutrale Spannungsumlagerung notwendig. In dieser Diplomarbeit wird das Werkstoffverhalten im plastischen Bereich durch eine bilineare Approximation mit Verfestigung gemäß folgender Abbildung 2.3 des Spannungs-Dehnungs-Diagramms angenähert ([5]).

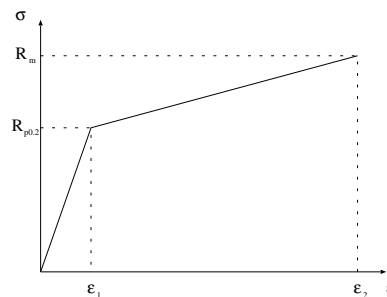


Abbildung 2.3: Spannungs-Dehnungs-Diagramm der bilinearen Approximation mit Verfestigung

Bis der Werkstoff im einachsigen Zugversuch die Streckgrenze $R_{p0.2}$ erreicht, befindet er sich im elastischen Bereich. Das elastische Verhalten beschreibt der Elastizitätsmodul (durch die Steigung

im elastischen Bereich des Spannungs-Dehnungs-Diagramms repräsentiert). Wird der Werkstoff über die Streckgrenze hinaus gedehnt, befindet er sich im plastischen Bereich. Bis zur Höchstkraft F_m bezogen auf den Anfangsquerschnitt, wird das Verfestigungsverhalten durch eine lineare Approximation repräsentiert. Diese obere Grenze der Spannung wird Zugfestigkeit R_m genannt. Dehnungen, die über den Wert ε_2 hinaus gehen, führen zu einem Sinken der Spannung und schließlich zum Bruch des Werkstoffs. Da in dieser Diplomarbeit die Dehnungen den Punkt ε_2 nicht überschreiten, kann das Werkstoffverhalten in diesem Bereich unberücksichtigt bleiben. Die Mehrachsigkeit wird durch die von Mises-Fließfunktion berücksichtigt.

Kapitel 3

Erstellen des Modells

3.1 Einleitung

Ein Problem bei Batterien ist, dass sie sehr schwer sind. Bei Motorrädern liegt das Gewicht der Batterien bei ca. 5 kg, bei Autos bei 10-20 kg. Das liegt größtenteils an den rund 60 darin befindlichen Bleigittern, welche parallel angeordnet sind ([6]).

Diese Bleigitter dienen der Zu- und Ableitung des Stroms und sind gleichzeitig Träger der aktiven Masse, die die Ladung speichert. Durch Verringern der Gitterdicke kann das Gewicht reduziert werden, allerdings sinkt dadurch auch die Lebensdauer der Batterie. Bei Gittern mit kleinerem Querschnitt nehmen die Verformungen zu, und die Wahrscheinlichkeit steigt, dass sich zwei benachbarte Gitter berühren. Durch solch einen Kontakt sinkt die maximale Kapazität und die Lebensdauer der Batterie. Ein Kompromiss zwischen Gewicht und Lebensdauer ist daher unvermeidlich.

Die Verformungen der Gitter werden bei der Firma DSL in Dresden durch Versuche ermittelt (Versuchsaufbau: Abbildung 3.1).

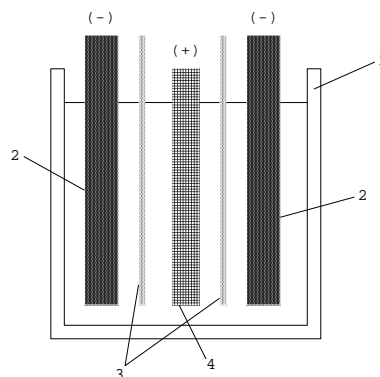


Abbildung 3.1: Versuchsaufbau

Dabei wird ein einzelnes Gitter (4) in ein mit konzentrierter Schwefelsäure gefülltes beheizbares Doppelwandgefäß (1) geführt. Dieses Gefäß sorgt während des Versuchs für eine konstante Temperatur der Säure von 75°C . Zwei in dem Gefäß befindliche Bleielektroden (2) sorgen für einen Dauerstrom von 6 mA/cm^2 . Zwei Kunststoffgitter (3) dienen als Abstandhalter.

Das Gitter weist nach einer Versuchsdauer von 10 Tagen, welches eine Belastungsdauer der Batterie von mehreren Jahren nachbildet, sichtbare Verformungen auf. Die Verformungen des Gitters entstehen durch Umwandlung des Bleis in Bleioxid, welches sich mit der Zeit ausdehnt. Diese Korrosionsschicht haftet am Blei und zieht das Gitter durch die Ausdehnung ebenfalls auseinander. Die Dehnungen des Gitters werden anhand von fünf horizontalen (1-5) und vier vertikalen (6-9) Messstrecken, Abbildung 3.2, ermittelt.

Diese Dehnungen des originalen Gitters wurden gemessen und können später mit den berechneten

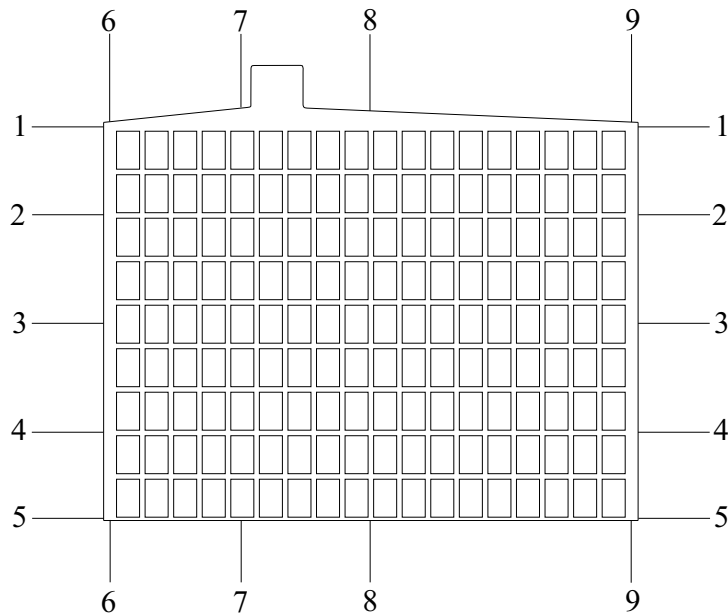


Abbildung 3.2: Messstrecken

Dehnungen verglichen werden. Das absolute Wachstum der Messstrecken liegt bei dem zehntägigen Experiment zwischen 2,35 und 5,99 mm, das spezifische Wachstum liegt zwischen 1,64 und 4,19 %.

3.2 Netzgenerierung

Bemerkenswert bei den Versuchen ist, dass sich das Gitter nicht nur parallel zum Gitter (x- und y-Richtung) ausdehnt, sondern sich auch eine wellenartige Verformung senkrecht zum Gitter (z-Richtung) einstellt. Diese Verformungsstärke wird gemessen, indem das verformte Gitter auf einen ebenen Untergrund gelegt wird, von der die maximale Erhebung gemessen wird. Bei dem in dieser Diplomarbeit nachgebildeten Batteriegitter lag diese Verformung bei mehr als 4 mm. Wegen dieser Verformungen, in x-, y- und z-Richtung, wurde ein dreidimensionales FEM-Modell gewählt, welches in der Lage sein sollte, diese Deformationen zu reproduzieren.

Als Elemente für die Diskretisierung des Problems wurden HEXE20-Elemente benutzt, diese können besser als HEXE8-Elemente Biegeverformungen von Körpern erfassen [7]. Damit ein möglichst gutmütiges Netz entsteht, liegt zwischen den Kanten der Quaderelemente immer ein Winkel von 90 Grad. Auch das Seitenverhältnis zwischen längster und kürzester Kante sollte nicht zu groß sein. Um dies zu erreichen wurde die, im Verhältnis zur Bleischicht, sehr dünne Korrosionsschicht im Modell um ein vielfaches vergrößert. Um ein realitätsnahes Modell zu gewährleisten wurde der für die Steifigkeit der Korrosionsschicht verantwortliche E-Modul um genau diesen Faktor verringert.

Die Diskretisierung des Gitters wurde manuell mit dem Preprozessor Felix, Kapitel A.2.1, durchgeführt. Anhand der Abmessungen des Originalbatteriegitters, Abbildung 3.3, wurde zunächst ein zweidimensionales Modell aufgestellt. Die Größe der Elemente wurde, wie in Abbildung 3.4 zu sehen, der Stegbreite angepasst.

Nach Modellierung des zweidimensionalen Gitters wurde durch Kopieren aller Elemente um die Schichtdicke in z-Richtung das 2D- in ein 3D-Modell überführt. Durch weitere drei Kopiervorgänge wurden die letzten Schichten erzeugt. Durch dieses sukzessive Aufbauen der vier Schichten, zwei innere Bleischichten und zwei äußere Oxidschichten, blieb die Knotennummerierung in einer halbwegs übersichtlichen Form erhalten. Jede Schicht ist somit mit einem bestimmten Bereich (Knoten k_1 bis k_2 ; Elemente e_1 bis e_2) selektierbar, wodurch das Postprocessing erleichtert wird, beispielsweise das Anzeigen von Spannungen einer bestimmten Schicht.

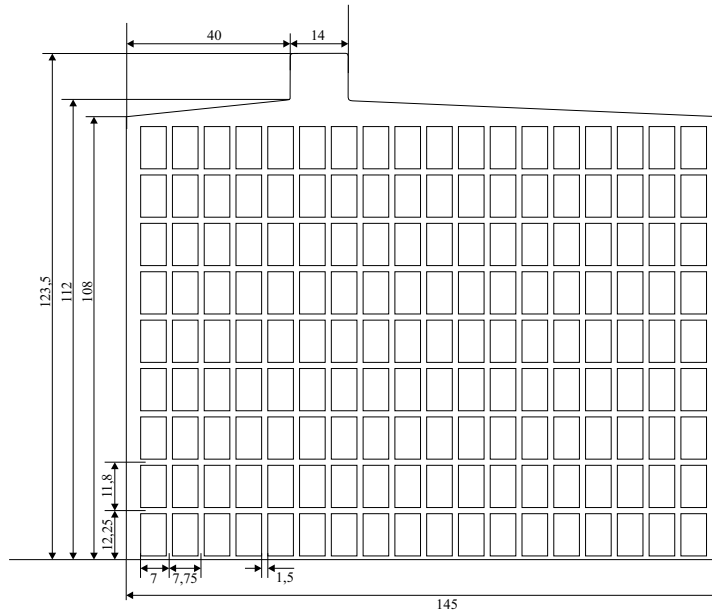
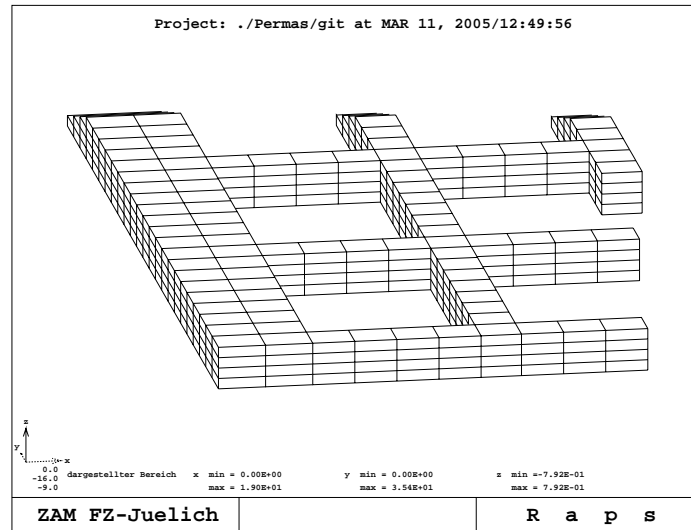
Abbildung 3.3: Abmessungen des Originalbatteriegitter, Dicke $d=0,943\text{mm}$ 

Abbildung 3.4: Gitteraufbau

Das mit Felix diskretisierte Batteriegitter besteht aus 9.264 Elemente mit 69.925 Knoten.

3.3 Aufbringen der Temperaturlast

Die Ursache für das Verformen des Gitters wird mit einer Temperaturlast auf die Korrosionsschichten modelliert. Das Programm weist jedem Knoten des FE-Netzes eine bestimmte Temperatur zu, die nur von der x- und y-Position des Knotens, sowie von den Parametern der Temperaturverteilung a_0, \dots, a_5 abhängt.

$$\text{Knotenlast}(x, y, a_0, \dots, a_5) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3y + a_4y^2 + a_5xy \quad (3.1)$$

Parameter	a_0	a_0	a_0	a_0	a_0	a_0
Einheit	K	$\frac{K}{mm}$	$\frac{K}{mm^2}$	$\frac{K}{mm}$	$\frac{K}{mm^2}$	$\frac{K}{mm^2}$

Tabelle 3.1: Einheiten der Parameter a_i

Da die Verformungen des Gitters einzig aus der Dehnung der äußeren beiden Korrosionsschichten entstehen, Kapitel 3.2, wurde der thermische Ausdehnungskoeffizient α der Bleielemente auf Null gesetzt (Tabelle B.1). Das Blei macht somit bei der Temperaturlast keine eigenen Verformungen.

Es wurde eine vollständig quadratische Ansatzfunktion für das Verteilungsmuster der Temperatur gewählt, da die Form des deformierten Gitters einer Kissenform ähnelt, sich also parabolische Verformungen an den Seiten des Gitters zeigen.

Knoten mit gleichen x- und y-Koordinaten erhalten die gleiche Temperaturlast. Somit besteht in dem Modell eine Symmetrie bezüglich der z-Achse innerhalb der Geometrie des Gitters und auch innerhalb der Lastverteilung. Da aber das reale Gitter Verformungen in z-Richtung erfährt, d.h. experimentell ist keine Symmetrie vorhanden, wurde kein 2D-Modell gewählt, welches die Symmetrie ausnützen würde.

3.4 Materialparameter

Ein weiterer wichtiger Bestandteil der *.dat*-Datei sind die Materialparameter. Dazu wurde zunächst jeder Schicht ein Materialname zugewiesen, welcher später definiert wird. Die beiden inneren Schichten bekamen die Materialeigenschaft *Blei*, die äußeren *Oxid* zugewiesen.

Für das hier gewählte Modell müssen Dichte, Wärmeausdehnungskoeffizient, Elastizitätsmodul und Querkontraktionszahl definiert werden. Da die Materialkenndaten der Korrosionsschicht nicht bekannt sind, wurden hierfür die gleichen Kenndaten wie für das Blei gewählt.

Beim Zuweisen der Kenndaten muss auf die Wahl der Basiseinheiten geachtet werden. Die Koordinaten der Knoten bei der Netzgenerierung wurden in Millimetern angegeben, so ist es wichtig, dass die Kenndaten, Tabelle B.1, darauf abgestimmt sind.

Der Wärmeausdehnungskoeffizient für das Blei ist Null, da das Blei keine eigenen Volumenänderung erfährt (Kapitel 3.3). Der Unterschied bei dem Elastizitätsmodul resultiert aus der Vergrößerung der Dicke der Korrosionsschicht. Aus Gründen der größeren Gutmütigkeit des Netzes wurde die Schichtdicke der Korrosion auf die Dicke des Bleis vergrößert. So wird eine zu hohe Abweichung zwischen größter und kleinster Kantenlänge eines Elementes vermieden. Die Dicke des Bleis nach dem zehntägigem Experiment beträgt 0,79178 mm, was zu einer Schichtdicke von 0,39589 mm der beiden Bleischichten führt. Die Gesamtdicke des Gitters ist 0,943 mm. Daraus ergibt sich eine Dicke von 0,07561 mm für die beiden äußeren Korrosionsschichten. Um vier gleich starke Schichten zu erlangen, müssen die beiden Korrosionsschichten um den Faktor 5,236 vergrößert werden. Gleichzeitig wird der Elastizitätsmodul der Korrosionsschichten um genau diesen Faktor gegenüber den beiden Bleischichten verkleinert.

Kapitel 4

Parameter-Identifikation

4.1 Beschreibung des Verfahrens

Um das Batteriegitterwachstum möglichst realitätsnah nachzubilden, wird eine Fehlerfunktion bestimmt, welche die Abweichung zwischen realem Wachstum und Wachstum des FEM-Modells darstellt.

Der Programmablauf wird durch folgendes Flussdiagramm in Abbildung 4.1 verdeutlicht:

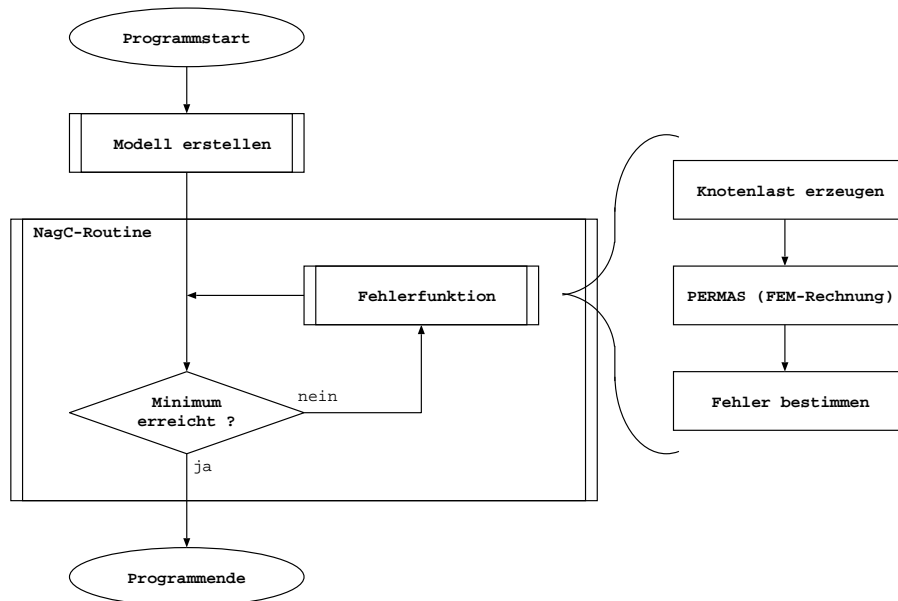


Abbildung 4.1: Ablaufplan

Im ersten Schritt wird das Modell erstellt. Die Knotenlast wird vor jeder PERMAS-Rechnung neu erzeugt und in das Modell eingefügt. Die zu minimierende Fehlerfunktion wird an die NagC-Routine übergeben. Die NagC-Routine ruft die Fehlerfunktion mit den Temperaturparametern a_0 bis a_5 (Kapitel 3.3) so oft auf bis nach der entsprechenden Methode (Simplexverfahren oder Konjugierte-Gradienten Verfahren) ein Minimum gefunden ist. Die Fehlerfunktion bestimmt zunächst anhand der Temperaturparameter (Formel (3.1)) die Knotenlast für alle Knoten des FEM-Netzes, welche in das bestehende Modell eingefügt werden. Nun wird die FEM-Rechnung durch Aufruf von PERMAS gestartet. Nach der PERMAS-Rechnung wird anhand der Verschiebungen der Knoten an den Enden der neun Messstrecken (Abbildung 3.2) die Dehnungen der Messstrecken des Modells bestimmt. Mit diesen neun Dehnungen des Modells wird nun eine Abweichung zu den im Versuch entstandenen Verformungen berechnet. Dieser Wert bestimmt den zu minimierenden Fehler.

Der Fehler wird mit der Standardabweichung berechnet, der mittleren quadratischen Abweichung,

ein Maß der Streuung [8]

$$\text{Fehler}(a_0, \dots, a_5) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\text{dehnung}_{fem}[i] - \text{dehnung}_{versuch}[i])^2}. \quad (4.1)$$

Dieser Fehler-Wert gibt die Abweichung zwischen den Dehnung des FEM-Modells und dem DSL-Versuchsgitter an, wobei N für die Anzahl der Messstrecken steht, hier also neun. Der Nachteil bei dieser Art der Berechnung ist, dass die Dehnung jeder Messstrecke mit gleichem Gewicht in den Fehler eingeht.

Da das Modell fünf horizontale und vier vertikale Messstrecken besitzt, ist davon auszugehen, dass das Verhalten auf der rechten und linken Seite des Gitters besser angenähert wird. Aus diesem Grund wird eine gewichtete Standardabweichung, Formel (4.2), benutzt, die es erlaubt, jeder Messstrecke ein Gewicht $g[i]$ zuzuteilen.

$$\text{Fehler}_{\text{gewichtet}}(a_0, \dots, a_5) = \sqrt{\frac{1}{G} \sum_{i=1}^N g[i] (\text{dehnung}_{fem}[i] - \text{dehnung}_{versuch}[i])^2}, \quad (4.2)$$

wobei

$$G = \sum_{i=1}^N g[i] \quad (4.3)$$

Die Gewichte der fünf horizontalen Messstrecken bleiben dabei auf 1 gesetzt, so dass das Gewicht aller horizontalen Messstrecken 5 ist. Damit eine faire Gewichtung erzielt wird, bekommen die Gewichte der vier vertikalen Messstrecken 1,25 zugewiesen, so dass das Gewicht aller vertikalen Messstrecken auch 5 ergibt.

Der nach Formel (4.2) berechnete Fehler ist nur noch abhängig von der Temperaturverteilung. Man kann nicht davon ausgehen, dass der Fehler Null wird, da die vorgegebene Temperaturverteilung zu einfach ist, allerdings ist man an einer Minimierung des Fehlers und der dazu passenden Temperaturverteilung interessiert. Das Finden eines Extremwertes (Minimum) einer bekannten Funktion ist in der analytischen Mathematik meist kein Problem. Notwendig dafür ist das Finden der Koeffizienten, welche alle partiellen Ableitungen verschwinden lassen. Dafür muss man die partiellen Ableitungen gleich Null setzen, und das so erhaltene Gleichungssystem lösen. Das ist aber hier nicht möglich, da hinter den Dehnungen des Modells $\text{dehnung}_{fem}[i]$, welche abhängig von den Parametern der Fehlerfunktion sind, die FEM-Rechnung steht. Um trotzdem zu einer Temperaturverteilung zu gelangen, die das Modell dem Versuch möglichst genau annähert, gibt es numerische Verfahren, die es ermöglichen, sich von einem vorgegebenen Startwert schrittweise dem Minimum zu nähern. In dieser Arbeit werden zwei verschiedene solcher Verfahren benutzt, das Simplexverfahren (Kapitel 4.2) und das Konjugierte-Gradienten Verfahren (Kapitel 4.3).

4.2 Das Simplexverfahren

Das in dieser Diplomarbeit aus der NagC-Bibliothek (Kapitel A.2.4) benutzte Simplexverfahren wurde von J.A. Nelder und R. Mead entwickelt ([9], [10]). Es ist ein direktes Suchverfahren zur Minimierung einer nicht-linearen Funktion f von N Parametern ($f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$), welches keine Informationen über Gradienten oder andere Ableitungen erfordert. Es wird jedoch auf effiziente

Weise Informationen aus vorangegangenen Funktionsberechnungen benutzt. Die Methode ist robust. Man darf allerdings keine hohe Präzision bei der Lokalisierung des Minimums erwarten.

Algorithmus: In jedem Iterationsschritt wird bei einer Funktion von N Parametern eine Menge von $N+1$ Punkten $x_1, x_2, \dots, x_N, x_{N+1}$ betrachtet. Diese Punkte können als Eckpunkte eines Polyeders oder *Simplexes* S betrachtet werden. Der *Simplex* soll nicht entartet sein, d.h. er umschließt ein endliches N -dimensionales Volumen. Die Vektoren von einem festen Punkt zu allen anderen N Punkten sind voneinander linear unabhängig. Bei Funktionen mit zwei Variablen entsteht so ein Dreieck, bei drei Variablen entsteht ein Tetraeder.

Die Funktionswerte $F_i = F(x_i)$ an den $N+1$ Punkten seien aufsteigend sortiert. Es gilt also:

$$F_1 \leq F_2 \leq \dots \leq F_N \leq F_{N+1}.$$

In einem Iterationsschritt wird ein neuer Punkt erzeugt, der den *schlechtesten* Punkt x_{N+1} , also der Punkt mit dem größten Funktionswert F_{N+1} , ersetzt. So entsteht in jeder Iteration ein neuer Simplex.

Dem *schlechtesten* Punkt x_{N+1} steht ein N -dimensionaler Simplex T gegenüber, gebildet durch die N besseren Punkte x_1, x_2, \dots, x_N . Um einen neuen Punkt zu finden erscheint es sinnvoll vom *schlechtesten* Punkt in Richtung der besseren N Punkte zu suchen, also in Richtung des Simplex T . Dazu wird zunächst ein weiterer Punkt konstruiert, der Schwerpunkt \bar{x} des Simplex T . Dieser wird vollgundermaßen definiert:

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i.$$

Zu Beginn einer jeden Iteration wird ein Testpunkt x_r (reflection) erzeugt, indem der *schlechteste* Punkt x_{N+1} am Schwerpunkt \bar{x} reflektiert wird:

$$x_r = \bar{x} + \alpha(\bar{x} - x_{N+1}); \quad \alpha > 0.$$

Die Konstante α und die folgenden Konstanten β, γ und δ können verschiedenen Werte annehmen. Typische Werte, die bei den durchgeführten Rechnungen benutzt wurden, sind: $\alpha = 1$; $\beta = 2$; $\gamma = 0,5$; $\delta = 0,5$.

Die zur Verdeutlichung des Verfahrens dienenden folgenden Abbildungen beziehen sich auf Funktionen mit zwei Variablen. Das Dreieck zwischen x_1, x_2 und x_3 (gestricheltes Dreieck) ist der aktuelle Simplex.

In der ersten Abbildung 4.2 wird zunächst der Schwerpunkt \bar{x} der beiden besten Punkte x_1 und x_2 gebildet. Der Testpunkt x_r entsteht durch Spiegelung des schlechtesten Punktes x_3 am Schwerpunkt ($\alpha = 1$).

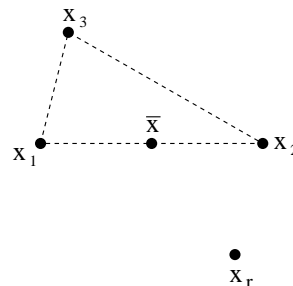


Abbildung 4.2: Erstellung des Schwerpunktes \bar{x} und des Testpunktes x_r ($\alpha = 1$)

Der Funktionswert $F_r = F(x_r)$ des Testpunktes wird ermittelt, und in Abhängigkeit des Wertes F_r unterscheidet man drei weitere Fälle:

1. $F_1 \leq F_r \leq F_N$

Der Testpunkt x_r ist ein mittlerer Punkt. Er ist nicht besser als der im Simplex T beste Punkt, und er ist nicht schlechter als der im Simplex T schlechteste Punkt. Jetzt wird aus dem Simplex T unter Hinzunahme des Testpunkt x_r ein neuer Simplex aus $N+1$ Punkten gebildet (Abbildung 4.3) und mit diesem Simplex eine neue Iteration gestartet.

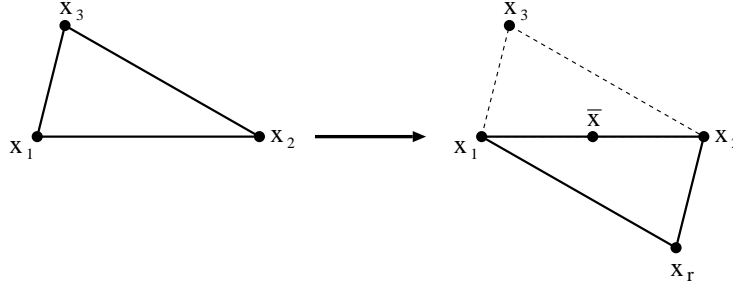


Abbildung 4.3: Spiegelung (1. mit $\alpha = 1$)

2. $F_r < F_1$

Der Testpunkt x_r ist der bisher beste Punkt, also der Punkt mit dem niedrigsten Funktionswert, man hat also vermutlich eine besonders gute Suchrichtung gefunden. Um diese Richtung weiter zu überprüfen, wird ein neuer Punkt x_e (expansion) bestimmt:

$$x_e = \bar{x} + \beta(x_r - \bar{x}); \quad \beta > 1$$

In Abbildung 4.4 ist der erweiterte Punkt x_e mit $\beta = 2$ erstellt worden.

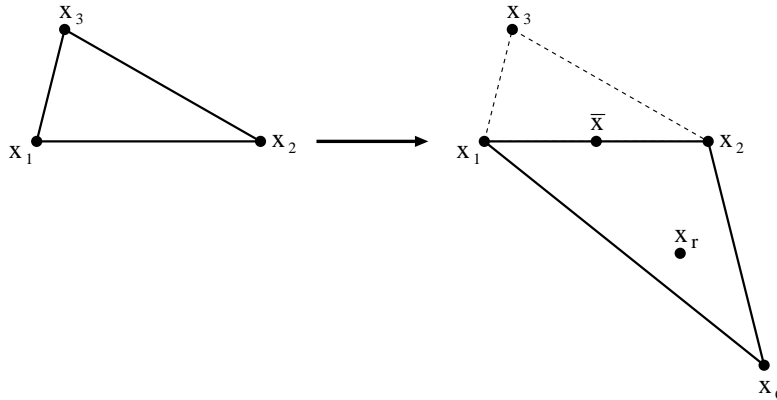


Abbildung 4.4: Expansion mit $F_e < F_r$ (2. mit $\beta = 2$)

Der Funktionswert $F_e = F(x_e)$ wird bestimmt. Für $F_e < F_r$ ist die Erweiterung noch besser und x_e wird mit dem Simplex T verknüpft und eine neue Iteration wird begonnen, andernfalls ist die Erweiterung nicht so gut und es wird mit x_r und T eine neue Iteration gestartet.

3. $F_r > F_N$

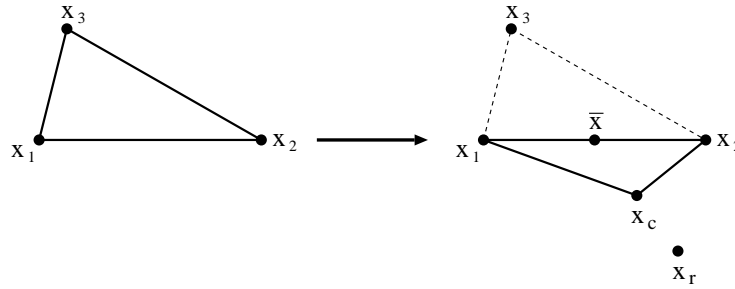
Der Simplex ist zu groß und muss verkleinert werden. Hierbei werden zwei weitere Fälle unterschieden:

i. $F_N < F_r < F_{N+1}$

Der Testpunkt x_r ersetzt den schlechtesten Punkt x_{N+1} . Dann wird ein neuer Punkt x_c (contraction) definiert:

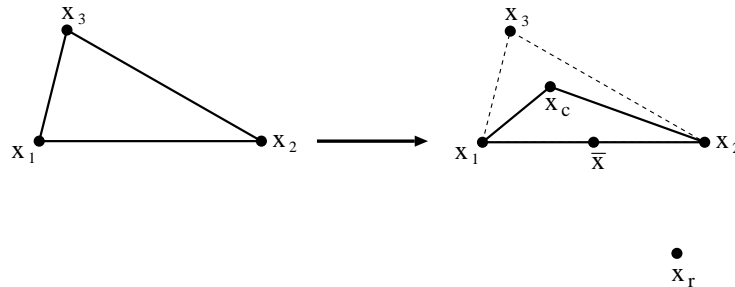
$$x_c = \bar{x} - \gamma(\bar{x} - x_r); \quad 0 < \gamma < 1$$

Ist x_c eine Verbesserung ($F_c = F(x_c) < F_r$), dann wird mit x_c und dem Simplex T eine neue Iteration begonnen (Abbildung 4.5).

Abbildung 4.5: Äußere Kontraktion (3.i. mit $\gamma = 0,5$)

- ii. $F_N < F_{N+1} < F_r$ Der Testpunkt x_r ist der schlechteste Punkt. Nun wird der vorhandene Simplex verkleinert, indem x_{N+1} zum Schwerpunkt hin verschoben wird (Abbildung 4.6).

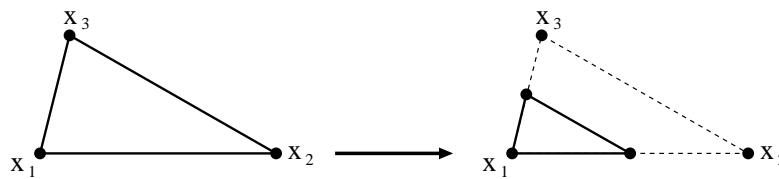
$$x_c = \bar{x} - \gamma(\bar{x} - x_{N+1}); \quad 0 < \gamma < 1$$

Abbildung 4.6: Innere Kontraktion (3.ii., $\gamma = 0,5$)

Auch hier wird eine neue Iteration mit x_c und Simplex T gestartet, falls x_c eine Verbesserung ist ($F_c < F_{N+1}$).

Falls in der Iteration kein besserer Wert als F_{N+1} gefunden wurde, erfolgt eine Verkleinerung des kompletten Simplexes. Dabei werden alle Punkte außer dem besten Punkt x_1 durch neue ersetzt (Abbildung 4.7).

$$x_j = x_1 + \delta(x_j - x_1); \quad j = 2, \dots, N+1; \quad 0 < \delta < 1$$

Abbildung 4.7: Verkleinerung des Simplexes ($\delta = 0,5$)

In diesem Fall sind N neue Funktionsberechnungen notwendig.

Abbruchkriterium: Das Minimum der Funktion nach dem Simplexverfahren ist gefunden, wenn die Streuung der $N+1$ Simplex-Punkte klein genug ist, also:

$$\sqrt{\frac{1}{N+1} \sum_{i=1}^{N+1} (F_i - \bar{F})^2} < \epsilon,$$

wobei \bar{F} der Mittelwert der Funktionswerte der $N+1$ Punkte x_1, \dots, x_{N+1} ist.

4.3 Das Konjugierte-Gradienten Verfahren

Das zweite in dieser Diplomarbeit benutzte Minimierungsverfahren, das Konjugierte-Gradienten Verfahren (CG-Verfahren, *conjugate gradients*, [11], [12], [13]), ist wie das Simplexverfahren ein direktes Suchverfahren. Bei diesem Verfahren werden Informationen über die erste Ableitung (Gradienten) benötigt. Die Grundidee dieses Verfahrens ist das Ausnutzen von Gradienteninformationen durch Berücksichtigung bereits durchgeführter Iterationen. Bei einer rein quadratischen Fehlerfunktion erreicht das Konjugierte-Gradienten Verfahren nach höchstens N Schritten exakt das Minimum, wobei N die Variablenanzahl der Funktion darstellt. Die Methode der konjugierten Gradienten ist folgende:

1. In jeder Iteration wird ausgehend von einem Punkt x_i eine Suchrichtung bestimmt, welche sowohl vom lokalen Gradienten, als auch von bereits genommenen Suchrichtungen abhängig ist.
2. Es wird das Minimum entlang der Suchrichtung bestimmt. Mit diesem Punkt (x_{i+1}) wird eine neue Iteration gestartet.

Eine Motivation für die Methode der konjugierten Gradienten kann aus folgender Abbildung 4.8 abgelesen werden.

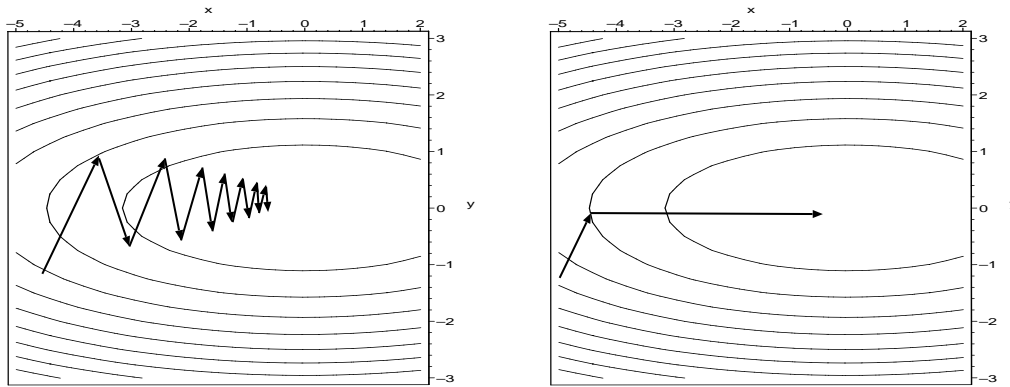


Abbildung 4.8: Verfahren des steilsten Abstieges sowie das Konjugierte-Gradienten Verfahren

Die Funktion, $f(x, y) = x^2 + 8y^2$, in diesem Beispiel (Abbildung 4.8) ist quadratisch mit zwei Parametern. Bei der Minimierung mit der Methode des steilsten Abstieges (linke Abbildung) verläuft die Minimumsuche entlang eines Zick-Zack-Kurses. Beim Konjugierte-Gradienten Verfahren wird zunächst vom Startwert die erste Suchrichtung bestimmt. Im folgenden wird das Minimum entlang dieser Suchrichtung erfasst. Nun wird eine neue Suchrichtung berechnet und entlang dieser das Minimum gesucht. Mit dem Konjugierte-Gradienten Verfahren wird das Minimum der Funktion $f(x, y) = x^2 + 8y^2$ nach genau zwei Schritten exakt erreicht.

Vor der Herleitung des Algorithmus die Definition von *konjugierten Vektoren*:

Definition 4.3.1. Seien h_1, \dots, h_n Vektoren in \mathbb{R}^n und A eine positiv definite Matrix. Dann nennt man h_1, \dots, h_n paarweise konjugiert in Bezug auf A , wenn gilt

$$h_i^T A h_j = 0; \quad \text{für alle } i < j.$$

Algorithmus: Es wird angenommen, dass das Minimum einer quadratischen Funktion

$$\Phi(x) = c^T x + \frac{1}{2} x^T G x \quad (4.4)$$

gesucht wird, wobei G eine symmetrisch positiv definite Matrix ist und $x, c \in \mathbb{R}^n$. Außerdem sei x_k eine erste Näherung des Minimums von Φ . Seien nun $k + 1$ linear unabhängige Vektoren $p_0, p_1, \dots, p_k \in \mathbb{R}^n$ gegeben, die einen Unterraum \mathcal{P}_k aufspannen, und P_k die Matrix mit den Spalten p_0, p_1, \dots, p_k .

Das Minimum von Φ über den Raum $x_k + \mathcal{P}_k$ ist folgendermaßen definiert:

$$\min_{w \in \mathbb{R}^{k+1}} \Phi(x_k + P_k w).$$

Nach Einsetzen von $x_k + P_k w$ in (4.4) und Weglassen aller von w unabhängigen Terme erhält man:

$$w^T p_k^T g_k + \frac{1}{2} w^T P_k^T G P_k w, \quad (4.5)$$

wobei $g_k = \nabla \Phi(x_k) = c + Gx_k$.

Die quadratische Funktion (4.5) wird minimal an dem Punkt

$$w = -(P_k^T G P_k)^{-1} p_k^T g_k.$$

Daraus folgt der neue Iterationspunkt x_{k+1} (Der Punkt im Raum $x_k + P_k w$, an dem Φ minimal wird)

$$x_{k+1} = x_k - P_k (P_k^T G P_k)^{-1} P_k^T g_k. \quad (4.6)$$

Die Iterationen nach diesem Schema haben folgende Eigenschaften: g_{k+1} , der Gradient von Φ an der Stelle x_{k+1} , ist orthogonal zu den Vektoren p_i , den Spalten von P_k . Dies kann folgendermaßen gezeigt werden:

$$\begin{aligned} P_k^T g_{k+1} &= P_k^T (c + Gx_{k+1}) \\ &= P_k^T g_k - P_k^T G P_k (P_k^T G P_k)^{-1} P_k^T g_k \\ &= 0, \end{aligned}$$

und folglich

$$g_{k+1}^T p_i = 0; \quad i = 0, \dots, k.$$

Falls in jeder Iteration die Punkte x_j , $j = 1, \dots, k$ durch Minimieren von Φ über den Unterraum $x_{j-1} + \mathcal{P}_{j-1}$ berechnet werden, erhält man

$$g_j^T p_i = 0; \quad j > i. \quad (4.7)$$

Mit Hilfe von (4.7) kann der Ausdruck (4.6) folgendermaßen vereinfacht werden

$$x_{k+1} = x_k + \gamma P_k (P_k^T G P_k)^{-1} e_k, \quad (4.8)$$

wobei e_k die k 'te Spalte der Einheitsmatrix und $\gamma = -g_k^T p_k$ ist.

Sehr stark vereinfachen lässt sich der Ausdruck (4.8), wenn die Matrix $P_k^T G P_k$ diagonal ist. Dies ist der Fall, wenn die $k+1$ Vektoren p_j , $j = 0, \dots, k$ paarweise konjugiert in Bezug auf die Matrix G sind, d.h.

$$p_i^T G p_j = 0; \quad i \neq j; \quad i, j = 0, \dots, k. \quad (4.9)$$

Dann erhält man folgende vereinfachte Form von Ausdruck (4.8)

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, \quad (4.10)$$

wobei

$$\alpha_k = -\frac{g_k^T p_k}{p_k^T G p_k}.$$

Der Wert α_k beschreibt die Schrittweite zum Minimum von Φ entlang p_k . Durch die Formel (4.10) erkennt man, dass der Vektor p_k als Suchrichtung für die Minimierung bezeichnet werden kann.

Entsprechend der Definition von Φ gilt

$$g_{i+1} - g_i = G(x_{i+1} - x_i) = \alpha_i G p_i. \quad (4.11)$$

Sei $y_i = g_{i+1} - g_i$, dann ist die Bedingung (4.9) gleichbedeutend mit $y_i^T p_j = 0$.

Um die eben benutzte Vereinfachung durchführen zu können, muss man sicherstellen, dass die p_i paarweise konjugiert in Bezug auf G sind. Dies erhält man dadurch, dass man als erste Suchrichtung p_0 die Richtung des steilsten Abstiegs $-g_0$ nimmt, und die folgenden Suchrichtungen p_k aus einer Linearkombination von g_k und den vorhergehenden Suchrichtungen errechnet

$$p_k = -g_k + \sum_{j=0}^{k-1} \beta_{kj} p_j. \quad (4.12)$$

Wenn die Richtung p_k wie in (4.12) definiert ist, dann ist g_k eine Linearkombination von p_0, p_1, \dots, p_k und daraus folgt, dass $g_i \in \mathcal{P}_k$ ist, solange die erste Suchrichtung $p_0 = -g_0$ ist. Daher gilt dann nach (4.7)

$$g_k^T g_i = 0; \quad i < k. \quad (4.13)$$

Im Folgenden wird gezeigt, wie man die p_k konstruieren muss, damit sie paarweise konjugiert im Hinblick auf G sind. Durch das Multiplizieren mit $p_i^T G$ der Gleichung (4.12) erhält man

$$p_i^T G p_k = -p_i^T G g_k + \sum_{j=0}^{k-1} \beta_{kj} p_i^T G p_j$$

und durch Einsetzen der Gleichungen (4.9) und (4.10)

$$p_i^T G p_k = -\frac{1}{\alpha_k} (g_{i+1} - g_i)^T g_k + \beta_{kj} p_i^T G p_j. \quad (4.14)$$

Wegen Gleichung (4.13) verschwindet der erste Term der rechten Seite von (4.14) für $i < k-1$. Um zu erreichen, dass p_k konjugiert zu p_i , für $i < k-1$ ist, kann man einfach $\beta_{ki} = 0$ setzen. Da nun $\beta_{k,k-1}$ der einzige Nicht-Null-Koeffizient ist, kann man den ersten Index von β wegfassen lassen. Um β_{k-1} so zu wählen, dass p_k konjugiert zu p_{k-1} ist, multipliziert man die Gleichung (4.12) mit y_{k-1}^T und wendet die Orthogonalitätsbedingung $y_{k-1} p_k = 0$ an. Dies ergibt

$$0 = -y_{k-1}^T g_k + \beta_{k-1} y_{k-1}^T p_{k-1},$$

oder

$$\beta_{k-1} = \frac{y_{k-1}^T g_k}{y_{k-1}^T p_{k-1}}. \quad (4.15)$$

Folglich kann p_k folgendermaßen berechnet werden

$$p_k = -g_k + \beta_{k-1} p_{k-1}, \quad (4.16)$$

wobei β_{k-1} nach Gleichung (4.15) errechnet wird. Durch die Orthogonalität der Gradienten und der Definition der p_k 's erhält man zwei weitere äquivalente Gleichungen für β_{k-1}

$$\beta_{k-1} = \frac{y_{k-1}^T g_k}{\|g_{k-1}\|_2^2} \quad \text{oder} \quad \beta_{k-1} = \frac{\|g_k\|_2^2}{\|g_{k-1}\|_2^2}.$$

Nach diesem Schema lassen sich Minima quadratischer Funktionen mit N Variablen nach genau N Schritten exakt bestimmen.

Die in dieser Diplomarbeit zu minimierende Funktion Φ ist allerdings nicht wie bisher angenommen quadratisch, da hinter der Berechnung des Fehlers die FEM-Rechnung steht. Um trotzdem das Konjugierte-Gradienten Verfahren anwenden zu können, muss man beachten, dass die Schrittweite α_k nicht mittels einer geschlossenen Formel bestimmt werden kann, sondern durch einen iterativen Prozess bestimmt werden muss. Dabei die exakte Schrittweite zu finden ist nahezu unmöglich. Auch die Suchrichtungen werden durch diese Ungenauigkeiten beeinträchtigt. Deshalb werden die Suchrichtungen errechnet durch $p_k = -M g_k$, wobei M eine positiv definite Matrix ist, welche durch Modifikation der Einheitsmatrix entsteht. Ein solches Vorgehen wird **Quasi-Newton'sche Methode** genannt. Beschreibt H_k eine Quasi-Newton Approximation der Inversen der Hesse-Matrix, wird die neue Suchrichtung folgendermaßen bestimmt:

$$p_k = -H_k g_k. \quad (4.17)$$

Wenn keine Informationen über die Hesse-Matrix zur Verfügung stehen wird für H_0 die Einheitsmatrix angenommen. Damit ist die Suchrichtung der Quasi-Newton Methode im ersten Iterationsschritt die gleiche wie die der Methode des steilsten Abstieges. Nachdem x_{k+1} berechnet wurde, wird eine neue Approximation H_{k+1} der Hesse-Matrix berechnet

$$H_{k+1} = H_k + U_k, \quad (4.18)$$

wobei U_k eine Update-Matrix ist.

Eine weitere Änderung des traditionellen Konjugierte-Gradienten Verfahrens beruht auf der nur mäßigen Konvergenzgeschwindigkeit nach n Iterationen bei komplexen Funktionen, wie der hier vorliegenden. In solch einem Fall ist es sinnvoll den iterativen Prozess mit dem zu letzt bestimmten Wert neu zu starten. Dieses Vorgehen wird *zyklisches CG-Verfahren* oder *CG-Verfahren mit Restarts* genannt.

Bei dem in der NagC-Bibliothek benutzten CG-Verfahren ([13]) wird die Update-Matrix U_k folgendermaßen berechnet:

$$U_k = -\frac{1}{y_k^T s_k} (H_k y_k s_k^T + s_k y_k^T H_k) + \frac{1}{y_k^T s_k} \left(1 + \frac{y_k^T H_k y_k}{y_k^T s_k}\right) s_k s_k^T, \quad (4.19)$$

wobei $y_k = g_{k-1} - g_k$ und $s_k = x_{k-1} - x_k = \alpha_k p_k$ ist.

Die **Abbruchbedingung** zum Beenden der Minimumsuche ist hierbei, wenn eine der folgenden drei Bedingungen erfüllt ist::

- i. $F_{k-1} - F_k < \tau_F (1 + |F_k|)$
- ii. $\|x_{k-1} - x_k\| < \sqrt{\tau_F} (1 + \|x_k\|)$
- iii. $\|g_k\| \leq \tau_F^{1/3} (1 + |F_k|)$ oder $\|g_k\| < \epsilon_A$, wobei ϵ_A der absolute Fehler ist, der durch Errechnen der Fehlerfunktion F entsteht.

Dabei ist τ_F eine vom Benutzer anzugebende Toleranz.

Kapitel 5

Auswertung

5.1 Einleitung

Mit den in Kapitel 4 beschriebenen Verfahren lässt sich jetzt die Temperaturverteilung (Kapitel 3.3) bestimmen, welche die Abweichung zwischen den Verformungen des Modells und den von DSL gemessenen Verformungen minimiert. Die in dieser Diplomarbeit benutzten Dehnungen (Tabelle 5.1), die das Modell möglichst gut reproduzieren soll, beziehen sich auf den Gitterwachstumstest der Probe 1273 vom 17.11.2003 ([14]).

Ausrichtung der Messstrecke	horizontal				
Messstreckennummer	1	2	3	4	5
absolutes Wachstum / mm	1,27	3,22	4,35	3,99	3,20
spezifisches Wachstum / %	0,89	2,26	3,05	2,79	2,24

Ausrichtung der Messstrecke	vertikal			
Messstreckennummer	6	7	8	9
absolutes Wachstum / mm	2,32	1,79	1,84	2,38
spezifisches Wachstum / %	2,13	1,59	1,64	2,18

Tabelle 5.1: Absolutes Wachstum Probe 1273 nach 10 Tagen, [14]

Anhand dieses Wachstumstests ist zu erkennen, dass das Gitter ein überraschend komplexes Verformungsmuster zeigt: Das Wachstum der horizontalen Messstrecken ist zur Mitte hin größer, während die vertikalen Messstrecken an den Seiten höheres Wachstum zeigen. Aus diesem Grund kann eine homogene Temperaturverteilung die Verformungen nicht nachbilden und die Ansatzfunktion der Temperaturverteilung wird entsprechend vollständig quadratisch gewählt (Kapitel 3.3).

Ein Problem beim Suchen der Lösung bestand darin, dass kleine Änderungen der Temperaturverteilung sehr starke Auswirkungen auf die Verformungen und damit den Fehler haben. Das liegt daran, dass bei kleinen Änderungen sehr große Unterschiede in den Verschiebungen der Knoten in z-Richtung und damit Sprünge in der Fehlerfunktion auftreten. Zurückzuführen sind die Sprünge auf den großen Unterschied in der Steifigkeit bei Zug bzw. Druck oder Biegung. Da das Gitter im Verhältnis zur Höhe und Breite relativ dünn ist, ergibt sich ein Größenordnungsunterschied von mehr als 4, der in etwa auch den Fehler in der FEM-Rechnung darstellt. Beim Konjugierte-Gradienten Verfahren war somit die Optimierung praktisch unausführbar, da eine numerische Bestimmung der Ableitung nicht möglich war. Auch beim Simplexverfahren war das Finden des globalen Optimums reine Glückssache. Aus diesem Grund wurde das FEM-System um mehrere Fesselungen (Kapitel 2.3) erweitert, die so nicht nur eine Starrkörperbewegung, sondern auch das „Flattern“ des Gitters verhindern. Dabei wurden alle Knoten die sich in der Mitte der Bleischicht befinden, also in Gittermitte, in z-Richtung gefesselt.

5.2 Elastisches Modell

5.2.1 Simplexverfahren

Zum Starten des Simplexverfahren ist es notwendig, dem Verfahren einen Startpunkt für den Lösungsweg zu übergeben. Wählt man dabei den Nullvektor, das Modell verformt sich also nicht, so ist der Fehler (zwischen Modell und Versuch) noch recht groß:

$$\text{Fehler}_{\text{gewichtet}}(0, 0, \dots, 0) = \sqrt{\frac{1}{G} \sum_{i=1}^N g[i](0 - \text{dehnung}_{\text{versuch}}[i])^2} = 2,81.$$

Damit die Minimumsuche schneller konvergiert, ist es also sinnvoll nach einem geeigneteren Startwert für das Verfahren zu suchen. Der einzige Parameter, der eine einfache und schnelle manuelle Verbesserung des Startwertes ermöglicht, ist der Parameter a_0 , der in der Temperaturverteilung den konstanten Term darstellt. Mit Erhöhen des Parameters a_0 bis zu einem bestimmten Wert sinkt der Fehler kontinuierlich, da die Dehnungen des Modells größer werden. Wählt man a_0 zu groß, sind die Dehnungen des Modells sämtlich größer als die gemessenen Dehnungen und eine Verkleinerung von a_0 ist ratsam. Es erscheint also plausibel nach einem a_0 zu suchen, welches die Dehnungen des Modells ähnlich groß werden lässt, wie die gemessenen Dehnungen. Nach Probe mehrerer konstanter Temperaturverteilungen ($[a_0 = 100; \text{Fehler} = 2,76]$, $[500; 2,53]$, $[1000; 2,26]$, $[2000; 1,72]$, $[4000; 0,88]$, $[8000; 2,16]$) war $a_0 = 4000$ ein sinnvoller Startwert. Bei dieser Wahl lagen die Dehnungen des Modells im horizontalen Bereich zwischen 2,64 und 2,65 und im vertikalen Bereich zwischen 1,96 und 2,04. Diese Werte sind ähnlich hoch, wie die von DSL gemessenen Dehnungen. Das Simplexverfahren wurde also mit dem Startvektor $x_0 = (4000; 0; 0; 0; 0; 0)$ begonnen.

Das Simplexverfahren bestimmt zunächst den ersten Simplex, mit dem es die erste Iteration startet, indem es um diesen Startvektor x_0 verschiedene Punkte erzeugt und die Funktionswerte für diese ausrechnet. Dies geschieht automatisch durch Addition von 1 bzw. 2 auf jeden Parameter. Das Verfahren wählt sieben Punkte mit möglichst geringen Funktionswerten aus, unter der Voraussetzung, dass trotzdem ein nicht entarteter Simplex entsteht (Kapitel 4.2). Nun startet das eigentliche Simplexverfahren.

Nach 312 Iterationen und 601 Funktionsauswertungen (entsprechen 601 FEM-Rechnungen) fand das Simplexverfahren die optimale Temperaturverteilung mit dem vollständig quadratischen Ansatz, wobei die Abbruchtoleranz $\epsilon = 10^{-6}$ war (Kapitel 4.2).

$$\begin{aligned} \text{Temperaturverteilung}_{\text{optimal_Simplex_elastisch}} = & 3921,9K + 2,989 \frac{K}{mm} x + \\ & 0,0135 \frac{K}{mm^2} x^2 + 85,45 \frac{K}{mm} y - 1,015 \frac{K}{mm^2} y^2 - 0,000788 \frac{K}{mm^2} xy. \end{aligned}$$

Es fällt auf, dass die von y abhängigen Parameter um mehr als eine Größenordnung größer sind als die von x abhängigen Parameter, was auch an folgender Abbildung 5.1, der nach dem Simplexverfahren optimalen Temperaturverteilung, deutlich wird.

Mit dieser Temperaturverteilung lag der Fehler zwischen gemessenen Dehnungen und Dehnungen des Modells bei

$$\text{Fehler}_{\text{optimal_Simplex_elastisch}} = 0,388742.$$

Die Dehnungen der einzelnen Messstrecken sind folgende:

Die Dehnungen der horizontalen Messstrecken werden durch das Modell sehr gut rekonstruiert. Auch sind sie zur Mitte hin größer. Die Dehnungen der vertikalen Messstrecken sind im Modell

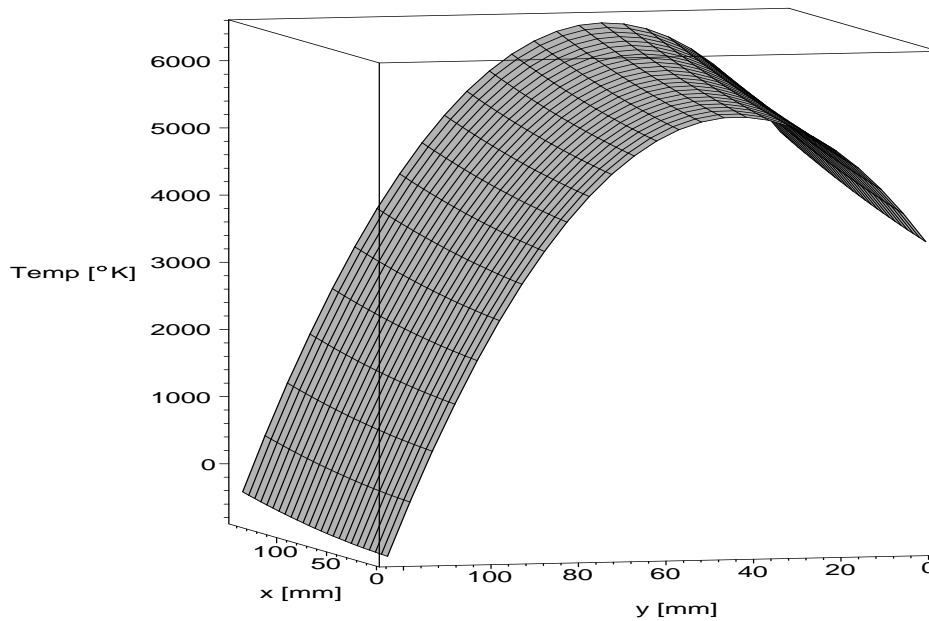


Abbildung 5.1: Temperaturverteilung nach dem Simplexverfahren (elastisches Modell)

Ausrichtung der Messstrecke	horizontal				
Messstreckennummer	1	2	3	4	5
von DSL gemessene Dehnung / mm	1,27	3,22	4,35	3,99	3,20
Dehnungen des Modells / mm	1,16	2,79	3,84	3,73	3,02

Ausrichtung der Messstrecke	vertikal			
Messstreckennummer	6	7	8	9
von DSL gemessene Dehnung / mm	2,32	1,79	1,84	2,38
Dehnungen des Modells / mm	2,37	2,33	2,42	2,73

Tabelle 5.2: Dehnungen mit optimaler Temperaturverteilung nach Simplexverfahren (elastisches Modell)

nahezu konstant, während die gemessenen Dehnungen zu Mitte hin geringer wurden. Die Verformungen des Gitters sind in nachstehender Graphik (Abbildung 5.2) zu sehen. Das dünn hinterlegte Gitter stellt das unverformte Gitter dar.

5.2.2 Konjugierte-Gradienten Verfahren

Auch das Konjugierte-Gradienten Verfahren benötigt einen Startwert zur Suche des Funktionsminimums. Wie beim Simplexverfahren (elastisches Modell) wurde der Startpunkt $x_0 = (4000; 0; 0; 0; 0; 0)$ gewählt (Kapitel 5.2.1), weil hier die Dehnungen des Modells ähnlich groß sind wie im Wachstumstest der Probe 1273 (Kapitel 5.1) beobachtet.

Wie in Kapitel 4.3 beschrieben, benutzt das CG-Verfahren die Informationen der ersten Ableitung zur Minimumsuche. Diese müssen numerisch bestimmt werden, da die Fehlerfunktion die Ergebnisse der FEM-Rechnung beinhalten. Dies geschieht mit dem zentralen Differenzenquotienten ([15]). Die partiellen Ableitungen g_i werden dabei folgendermaßen berechnet:

$$g_i(x) = \frac{f(x + h_i) - f(x - h_i)}{2 \cdot h_i} \quad , \text{für } i = 0..5.$$

Die Schrittweite h_i in Richtung des i 'ten Parameters (a_0, \dots, a_5) sollte möglichst klein gewählt werden, um eine möglichst hohe Genauigkeit der partiellen Ableitung des i 'ten Parameters zu erreichen. Da aber ein sehr kleines h_0 in Richtung des Parameters a_0 keine Änderung des Fehlerwertes bewirkt, wäre die erste partielle Ableitung immer identisch Null. Andere Parameter sind weniger

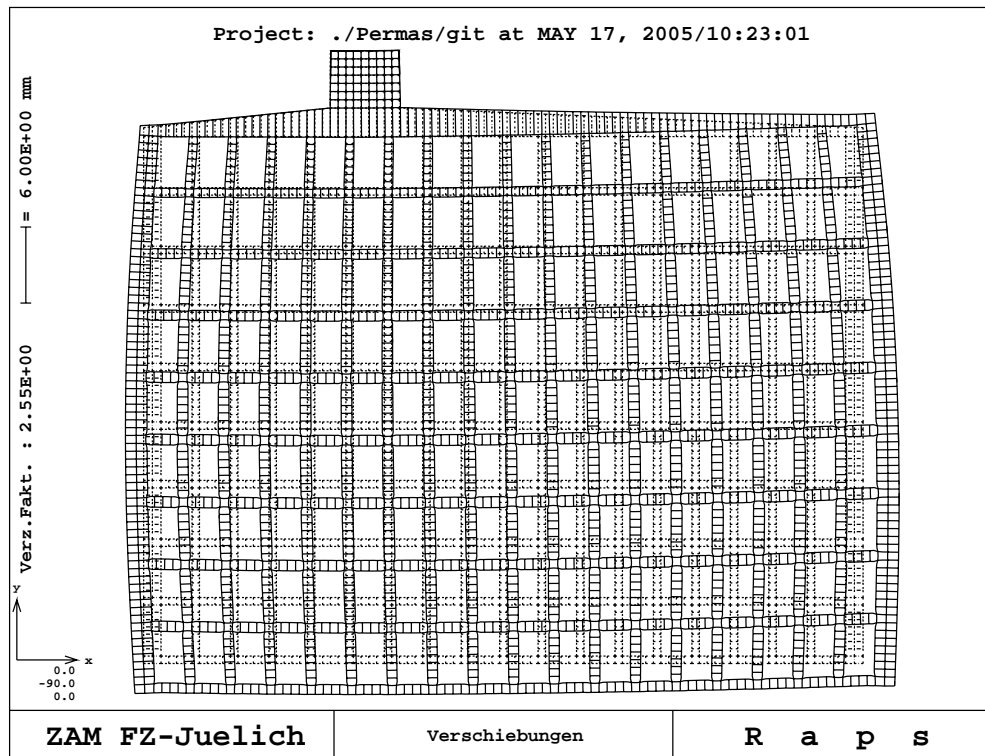


Abbildung 5.2: Verformtes Gitter nach dem Simplexverfahren (elastisches Modell) 2,55-fach überhöht

„stabil“ und erlauben ein kleineres h . Deshalb wurden für jeden Parameter individuelle Schrittweiten benutzt, um eine hohe Genauigkeit zu erreichen, aber trotzdem ein zu Null werden von partiellen Ableitungen außerhalb des Umfeldes des Minimums zu verhindern. In folgender Tabelle 5.3 sind die Schrittweiten h_i der Differenzenquotienten der partiellen Ableitungen aufgeführt.

Parameter	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5
Schrittweite h_i	10^{-2}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}

Tabelle 5.3: Schrittweiten für die Berechnung der partiellen Ableitungen mittels Differenzenquotienten mit wie in Tabelle 3.1 dargestellten Einheiten

Bevor die NagC-Routine aufgerufen wird, hat der Benutzer die Möglichkeit, optionale Einstellungen zu setzen, die Informationen über die zu minimierende Funktion beinhalten. In dieser Diplomarbeit wurden zwei wesentliche Einstellungen gesetzt:

1. Schätzung des Minimums (f_{est})

Dieser Parameter wurde auf Null gesetzt, da dieser die untere Schranke für die Fehlerfunktion ist. Das Setzen dieses Parameters hat den Vorteil, dass die Schrittweite begrenzt wird und keine unnötigen Funktionsaufrufe mit sehr großen Parametern gestartet werden.

2. Genauigkeit der zu minimierenden Funktion (f_{prec})

Das Setzen dieses Parameters ist sinnvoll, wenn die Genauigkeit der zu minimierenden Funktion sehr viel schlechter als Maschinengenauigkeit ist. Dies verhindert, dass das CG-Verfahren Funktionsauswertungen an Punkten bestimmt, die zwischen Punkten liegen, deren Unterschied in den Funktionswerten kleiner ist als der durch die FEM-Rechnung zu erwartende Fehler. Somit werden weitere unnötige Funktionsauswertungen vermieden. Der Parameter f_{prec} wurde auf 10^{-6} gesetzt, welches einem unteren Wert der Genauigkeiten der PERMAS-Rechnung entspricht, welche automatisch nach jeder PERMAS-Rechnung ausgegeben werden. Fehler innerhalb der Messstrecken wurden hierbei vernachlässigt.

Das CG-Verfahren fand nach 306 Iterationen und 153 Funktionsaufrufen ein „Minimum“ (Endpunkt = (4954; 6, 15; 0,0016; 4,302; -0,219; -0,0094) bei einem Fehler von 0,57866), wobei die Abbruchtoleranz hier 10^{-4} war. Beim CG-Verfahren sind für jeden Funktionsaufruf, nicht wie

beim Simplexverfahren eine PERMAS-Rechnung, sondern 13 PERMAS-Rechnungen erforderlich. Eine für die Funktionsauswertung an der gerade befindlichen Stelle und 12 für das Bilden der sechs partiellen Ableitungen. Bis zum Finden des „Minimums“ waren also fast 2000 FEM-Rechnungen erforderlich.

Startet man das CG-Verfahren allerdings erneut mit dem „Minimum“ als Startwert findet das CG-Verfahren einen weiteren besseren Wert. Bei erneutem Starten des CG-Verfahrens mit dem letzten Endpunkt wird nochmals ein besserer Punkt gefunden. Der Fehler des letzten Endpunktes (4942, 1; 5, 6587; 0, 0013875; 8, 43969; $-0,31788$; $-0,0085578$) betrug nur noch 0,5398. Es ist also möglich das „Minimum“ des CG-Verfahren durch weitere manuelle Restarts zu verbessern. Aus Zeitgründen wurde nach zwei manuellen Restarts die Optimierung mit dem CG-Verfahren beendet. Auch hier ist allerdings zu erkennen, dass die von y abhängigen Parameter größer sind als die von x abhängigen. Dies bestätigt also das Ergebnis der Simplex-Optimierung.

In der folgenden Abbildung 5.3 sind beste Temperaturverteilung nach dem dritten Durchlaufen des CG-Verfahren (dunkel) und optimale Temperaturverteilung des Simplexverfahren (hell) dargestellt.

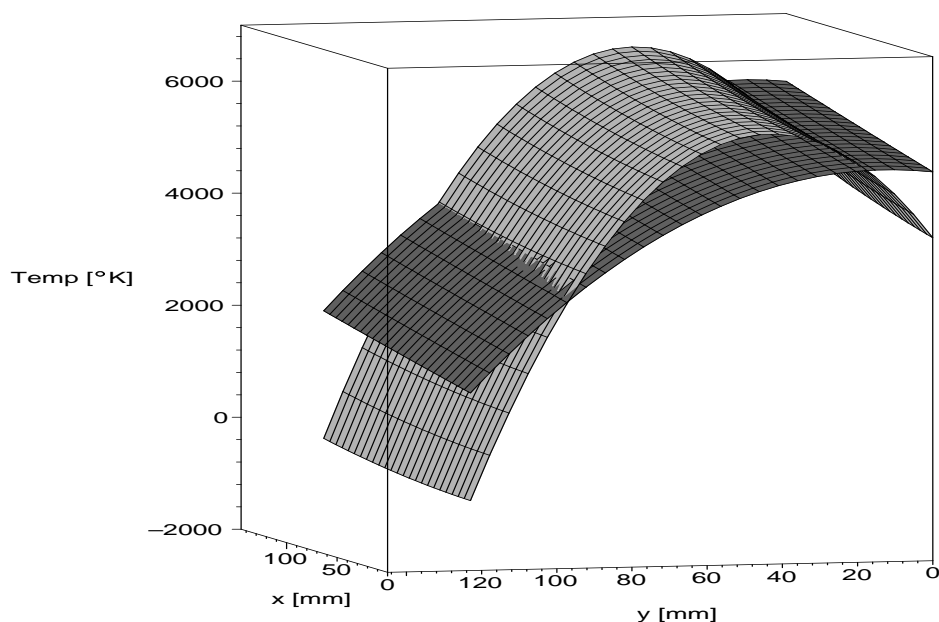


Abbildung 5.3: Temperaturverteilung von Simplex- (hell) und CG-Verfahren (dunkel)

5.3 Plastisches Modell (nur Simplexverfahren)

Da es sich bei dem Batteriegitterwachstum um bleibende Verformungen handelt, ist es realitätsnäher ein plastisches Modell (Bilineare Approximation mit Verfestigung, Kapitel 2.7) zu wählen. Um die PERMAS-Rechnung im plastischen Bereich durchführen zu können sind weitere Materialparameter (Tabelle B.2) erforderlich. Eine plastische Rechnung dauert allerdings etwa viermal so lange wie eine elastische Rechnung und ist auf Zampano (A.1.1) durch die große Anzahl an Funktionsaufrufen in akzeptabler Zeit nicht möglich. Auf Jump (A.1.2) braucht hingegen eine Rechnung des plastischen Modells nur etwa drei Minuten. Da aber auf Jump im Normalfall nur Jobs bis zu einer Zeitdauer von 24 Stunden gerechnet werden, wurde zunächst versucht, die in dem elastischen Modell relevanteren Parameter, also den konstanten Term a_0 und die von y abhängigen Parameter a_3 und a_4 , zu optimieren. Der Startwert für die Parameteridentifikation mit dem plastischen Modell wurde ebenfalls durch Testen verschiedener Werte des Parameters a_0 manuell bestimmt ($[a_0 = 1000; \text{Fehler} = 1,99]$, $[2000; 1,25]$, $[4000; 2,00]$). Der Wert $a_0 = 2000$ war demnach der beste der getesteten Werte, da er den geringsten Fehler aufwies, und daher wurde das Simplexverfahren mit diesem Startwert durchgeführt. Nach 95 Iterationen (175 plastische PERMAS-Rechnungen) fand das Simplexverfahren das Optimum, wobei der Fehler, also die Abweichung zu

den gemessenen Dehnungen, bei 0,4109 lag. Unter Hinzunahme der anderen drei Parameter (a_1 , a_2 , a_5) und Starten des Simplexverfahren mit dem Endwert der plastischen Rechnung mit reduzierter Parameteranzahl als Startwert lag die optimale Temperaturverteilung des plastischen Modells bei:

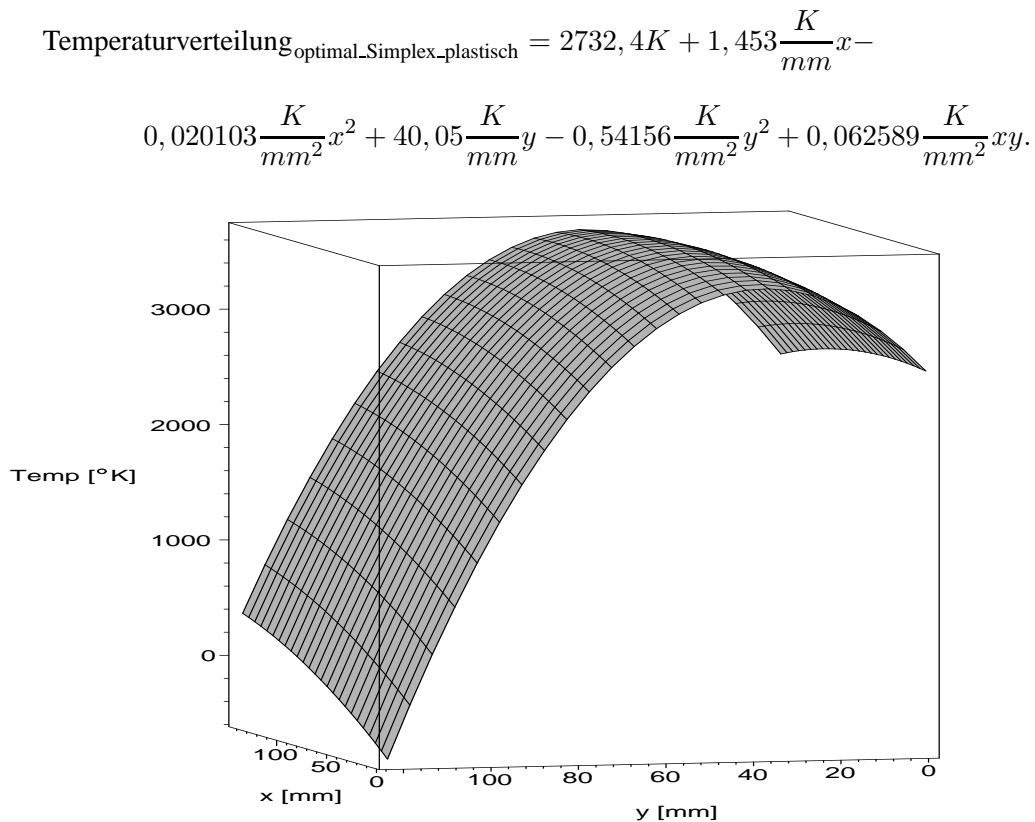


Abbildung 5.4: Temperaturverteilung von Simplexverfahren nach dem plastischen Modell

Mit dieser Temperaturverteilung lag der Fehler bei:

$$\text{Fehler}_{\text{optimal_Simplex_plastisch}} = 0,402605$$

Der Fehler ist unter Berücksichtigung aller Parameter nicht wesentlich kleiner geworden als bei dem Modell mit reduzierter Parameteranzahl (0,4109). Anhand der folgenden Tabelle 5.4 sind die Dehnungen der einzelnen Messstrecken abzulesen.

Ausrichtung der Messstrecke	horizontal				
Messstreckennummer	1	2	3	4	5
von DSL gemessene Dehnung / mm	1,27	3,22	4,35	3,99	3,20
Dehnungen des Modells (plastisch, alle Parameter) / mm	1,25	2,64	3,91	3,78	2,93

Ausrichtung der Messstrecke	vertikal			
Messstreckennummer	6	7	8	9
von DSL gemessene Dehnung / mm	2,32	1,79	1,84	2,38
Dehnungen des Modells (plastisch, alle Parameter) / mm	2,36	2,35	2,45	2,66

Tabelle 5.4: Dehnungen mit optimaler Temperaturverteilung nach Simplexverfahren (plastisches Modell)

Die Verformungen des Batteriegiters mit der optimalen Temperaturverteilung nach dem plastischen Modell unterscheiden sich nur marginal von den Verformungen nach dem elastischen Modell: Auch hier ist zu erkennen, dass sich die Dehnungen der horizontalen Messstrecken des Modells besser an die gemessenen Dehnungen anpassen, als die vertikalen Dehnungen.

5.4 Interpretation

Die berechneten Temperaturverteilungen repräsentieren den Korrosionsgrad. Sowohl die Parameterschätzungen nach dem elastischen Modell (Simplex- und Konjugierte-Gradienten-Verfahren), als auch nach dem plastischen Modell (nur Simplexverfahren) zeigen eine starke Abhängigkeit von y . Die von x abhängigen Parameter sind dabei sehr klein. Daraus erkennt man, dass der elektrochemische Prozess über die Gitterbreite zwar gleichförmig, aber über die Gitterhöhe stark inhomogen ist. Vor allem die zuverlässigeren Rechnungen nach dem Simplexverfahren zeigen, dass der Korrosionsgrad etwa in mittlerer Höhe ein deutlich hervortretendes Maximum hat (Abbildung 5.5). An der Unterkante des Batteriegiters beträgt der Korrosionsgrad nur etwa 75 % (plastisches Modell) bzw. 65 % (elastisch) des Maximums. An der Oberkante des Gitters findet dagegen praktisch keine Korrosion statt. Die negativen Temperaturen an kleinen Bereichen der Oberkante würden ein negatives Wachstum (also Verkleinerung) durch die Korrosion bedeuten, was nicht möglich ist. Dies ist durch Ungenauigkeiten der Approximation der Temperaturverteilung zu erklären und kann demzufolge vernachlässigt werden.

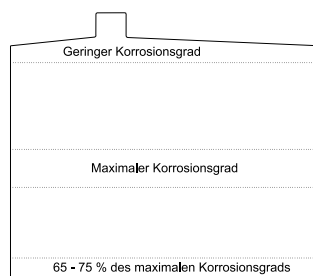


Abbildung 5.5: Korrosionsgrade

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Diplomarbeit war es Batteriegitterwachstum, ausgelöst durch Korrosion, zu modellieren. Die Korrosion entsteht durch eine elektrochemische Reaktion der in der Batterie befindlichen Bleigitter mit Schwefelsäure. Zur Modellierung wurde die Finite Element Methode (FEM) gewählt, welche numerische Verfahren zur Berechnung von Verformungen bereitstellt. Das Batteriegitter wurde dabei in Schichten unterteilt (Oxid - Blei - Oxid). Das durch die Korrosion entstandene Wachstum des Gitters wird mittel Temperaturänderung in den Oxid-Schichten modelliert. Man war also an einer Temperaturverteilung interessiert, die das Modell ähnlich wachsen lässt wie im Versuch. Dabei galt es, die Parameter der Temperaturverteilung zu identifizieren.

Das Wachstum wurde im Versuch an verschiedenen Messstrecken erfasst. Da die Verformungen des Gitters nicht linear waren, wurde eine vollständig quadratische Temperaturverteilung gewählt. Zur Identifikation der Parameter wurde eine Fehlerfunktion aufgestellt, die die Abweichungen zwischen den Dehnungen des Modells und gemessenen Dehnungen repräsentiert. Das Minimum dieser Funktion bestimmt die besten Parameter und ihre dazugehörige Temperaturverteilung. Zur Minimierung dieser Funktion wurden zwei mathematische Methoden benutzt, das Simplexverfahren und das Konjugierte-Gradienten Verfahren.

Das Simplexverfahren erwies sich als das robustere, da sich das Konjugierte-Gradienten Verfahren, durch die Benutzung von Ableitungen zu Suche der Parameter, anfälliger gegenüber numerischen Fehlern erwies. Das Simplexverfahren fand somit erheblich schneller eine Temperaturverteilung, welche das Modellgitter ähnlich wachsen lies, wie im Experiment beobachtet. Die mit dieser Fehlerfunktion optimalen Temperaturverteilungen sind sehr stark von y abhängig. In x -Richtung ist die Temperatur bei festem y nahezu konstant. Der elektrochemische Prozess ist also über die Gitterhöhe inhomogen, während die Reaktionen über die Gitterbreite nahezu gleichförmig sind.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass das beobachtete Gitterwachstum durch eine rein mechanische Betrachtung nicht zu erklären ist. Die Gründe für die Inhomogenität sind in der komplexen Elektrochemie des Prozesses zu suchen. Daher stellen sich einige Fragen, die zusammen mit der Firma DSL, dem Hersteller des Batteriegitters, geklärt werden müssen:

1. Welche Konsequenzen kann man für die Durchführung der Experimente ziehen?
2. Erwartet man in realen Batterien ähnlich inhomogene Korrosionsverteilungen?

Falls die inhomogene Temperaturverteilung für Batterien typisch sein sollte, so ist zu klären, ob die Batterie auch in Bereichen mit einem geringen Korrosionsgrad wirksam ist. Dann könnte man nämlich versuchen, das Gitter vorzugsweise in diesem Bereich zu lokalisieren. Das Ergebnis wäre eine korrosionsarme Batterie mit großer Lebensdauer. Falls das Batteriegitter an Stellen mit höherem Korrosionsgrad auch wirksamer ist und dies ist zu erwarten, so könnte man entweder versuchen, die Inhomogenität gezielt zu minimieren, oder die Gitterdicke in den entsprechenden Bereichen zu erhöhen. Mit der Gitterdicke erhöht sich die Steifigkeit des Gitters und die Verformungen nehmen ab. Allerdings muss dann ein Kompromiss zwischen Lebensdauer und Gewicht der Batterie gefun-

den werden.

Anhang A

Eingesetzte Hard- / Software

Die für diese Diplomarbeit benutzten Hard- und Software wird in diesem Kapitel kurz beschrieben.

A.1 Genutzte Computer

A.1.1 Zampano

Der Zampano (ZAM Parallel Nodes [16]) ist ein Linux-SMP-Cluster, bestehend aus acht Knoten für die Berechnungen (compute node), sowie einem Loginknoten (service node). Jeder der neun Knoten besitzt vier 550 MHz Intel Pentium III Xeon Prozessoren und 2 GB Hauptspeicher. Da bei komplexen FEM-Problemen der Rechenaufwand sehr hoch ist, werden die Berechnungen auf die Prozessoren des Knotens, auf dem das Programm läuft, verteilt. So ist es möglich den Zeitaufwand für die Berechnungen drastisch zu senken. Tabelle A.1 zeigt den Zeitaufwand für eine lineare PERMAS-Rechnung bei 1, 2 und 4 Prozessoren.

Anzahl Prozessoren	benutzter Hauptspeicher (MB)	Zeitaufwand (s)
1	600	271
2	600	227
4	600	191

Tabelle A.1: Zeitaufwand Zampano

A.1.2 Jump

Der IBM-Supercomputer Jump (Juelich multi processor [17]) besteht aus 41 IBM p690-Knoten mit jeweils 32 Prozessoren des Typs POWER4+ (1,7 GHz Taktrate) sowie 128 GByte Hauptspeicher. Er erreicht eine Peakleistung von 8,9 TFlops mit einem Gesamthauptspeicher von 5,2 TByte und war damit einer der 30 leistungsfähigsten Rechner der Welt (Stand: November 2004, [18]). Aufgrund des hohen Rechenaufwandes plastischer Rechnungen des Modells (Kapitel 6) wurden diese auf Jump durchgeführt.

A.2 Software

A.2.1 Felix

Felix ist ein Modelleditor (Preprozessor) für das FEM-Programm PERMAS. Er dient dazu, die manuelle Diskretisierung des Gesamtproblems vorzunehmen. Anhand der Abmessungen des Gitters ist es so möglich gegebene Batteriegitter-Geometrien graphisch unterstützt zu erzeugen.

A.2.2 PERMAS

PERMAS ist ein von Intes GmbH entwickeltes Software-System, welches in dieser Diplomarbeit in der Version 9.00.103 für das Lösen der FEM-Berechnungsaufgaben benutzt wurde [19]. Die PERMAS Eingabe besteht aus zwei Dateien (*projekt.dat*, *projekt.uci*).

Die *.dat*-Datei enthält die Modellbeschreibung (Fesselungen, Materialdaten) und kann zum Teil (Knoten und Elemente) von Felix erzeugt werden. In dem *.uci*-File steht die Job-Steuerung für PERMAS. Die benötigten Ergebnisse (Spannungen, Verschiebungen) werden durch diese Steuerdatei angefordert.

Der Aufruf von PERMAS in einer vereinfachten Form ist:

```
permas projekt [-memory <xxx>MB] [-shared <1-N>],
```

wobei <xxx> die Hauptspeichieranforderungen in MByte und <1-N> die Anzahl der zu benutzenden Prozessoren der PERMAS-Rechnung darstellt.

Die für diese Diplomarbeit relevanten Ergebnisse der FEM-Berechnung, u. a. die Verschiebungen der Knoten, werden von PERMAS in die Datei *projekt.post* geschrieben.

Die Lasten (Temperaturlasten, Kapitel 3.3) des Problems werden mittels eines Programms vor jeder PERMAS-Rechnung neu erzeugt und in die *.dat*-Datei eingefügt.

A.2.3 RAPS

RAPS ist ein im Forschungszentrum entwickeltes Programm zur Visualisierung von Ergebnissen aus FEM-Systemen (Postprozessor). Um Datensätze aus der PERMAS-Rechnung verarbeiten zu können, muss zuvor die *.post*-Datei mittels des Tools „PERFI“ in von RAPS lesbare Dateien konvertiert werden [20].

A.2.4 NagC-Bibliothek

Das in dieser Arbeit entwickelte Programm, welches den automatischen Ablauf und das Angleichen des Modells an das Versuchsgitter steuert, ist in der Programmiersprache C geschrieben. Für die Suche nach der Temperaturverteilung, die die geringste Abweichung zwischen Modell und gemessenen Verformungen erzeugt, werden zwei Algorithmen aus der NagC-Bibliothek [13] benutzt. Das Simplexverfahren von Nelder und Mead und das Konjugierte-Gradienten-Verfahren. Diese beiden Verfahren werden im Kapitel 4 detailliert beschrieben.

Anhang B

Materialkenndaten

Kenndaten	Blei	Oxid
Dichte $\rho [\frac{kg}{mm^3}]$	$11,34 \cdot 10^{-6}$	
Wärmeausdehnungskoeffizient $\alpha [K^{-1}]$	0,0	$2,88 \cdot 10^{-5}$
Elastizitätsmodul $E [\frac{mN}{mm^2}]$	$1,4 \cdot 10^7$	$2,6738 \cdot 10^6$
Querkontraktionszahl ν	0,42	

Tabelle B.1: Materialkenndaten für das elastische Modell

Kenndaten	Blei	Oxid
Dichte $\rho [\frac{kg}{mm^3}]$	$11,34 \cdot 10^{-6}$	
Wärmeausdehnungskoeffizient $\alpha [K^{-1}]$	0,0	$2,88 \cdot 10^{-5}$
Elastizitätsmodul $E [\frac{mN}{mm^2}]$	$8,533 \cdot 10^6$	$2,6738 \cdot 10^6$
Querkontraktionszahl ν	0,42	
Streckgrenze $R_{p0.2} [\frac{mN}{mm^2}]$	$2,8375 \cdot 10^4$	∞
Dehnung ε_1 an der Streckgrenze [%]	0,3325	∞
Zugfestigkeit $R_m [\frac{mN}{mm^2}]$	$3,625 \cdot 10^4$	-
Dehnung ε_2 an der Zugfestigkeit [%]	4,0875	-

Tabelle B.2: Materialkenndaten für das plastische Modell mit linearer Verfestigung

Literaturverzeichnis

- [1] Y. Liu (2003)
Introduction to the Finite Element Method.
Lecture Notes, University of Cincinnati.
- [2] M. Jung, U. Langer (2001)
Finite-Element-Methode: Eine Einführung für Ingenieurstudenten. Eine Einführung in die numerischen Grundlagen und Computersimulationen.
Teubner, Stuttgart, Leipzig, Wiesbaden.
- [3] U. Gabbert (2003)
Computational Mechanics - Grundlage für die Entwicklung intelligenter Produkte.
Magdeburger Wissenschaftsjournal 1-2/2003.
- [4] M. Staat (2003)
Technische Mechanik.
Vorlesungsskript, FH-Aachen, Jülich.
- [5] K. Burth, W. Brocks (1992)
Plastizität: Grundlagen und Anwendungen für Ingenieure.
Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden.
- [6] L. F. Trueb, P. Rüetschi (1997)
Batterien und Akkumulatoren.
Mobile Energiequellen für heute und morgen, Springer, Berlin.
- [7] H. Feldmann (1998)
Finite Elemente Methode (FEM).
Vorlesungsskript, FH-Kiel.
- [8] P. Jansen (2002)
Einführung in die Wahrscheinlichkeitsrechnung und Statistik.
Vorlesungsmitschrift, Forschungszentrum Jülich.
- [9] J. A. Nelder, R. Mead (1965)
A Simplex Method for Funktion Minimization.
The Computer Journal, Volume 7, pp. 308-313.
- [10] J. M. Parkinson, D. Hutchinson (1972)
An Investigation Into the Efficiency of Variants of the Simplex Method.
Numerical Methods for Nonlinear Optimization, Academic Press, London and New York.
- [11] P. E. Gill, W. Murray, M. H. Wright (1981)
Practical Optimization., Academic Press, London and New York.
- [12] A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri (2000)
Numerical Mathematics., Springer, Berlin.
- [13] NAG-C - Online Manual (2005)
<http://www.co.uk/numeric/cl/CLdescription.asp>

- [14] DSL Dresden Material - Innovation GmbH
Interner Technischer Bericht
<http://www.dsl-dresden.de/>
- [15] P. E. Gill, W. Murray, M. A. Saunders, M. H. Wright (1983)
Computing Forward-Difference Intervalls for Numerical Optimization.
SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, pp. 310-321.
- [16] Zampano Online Documentation
ZAMpano - ZAM Parallel Nodes.
<http://zampano.zam.kfa-juelich.de/>
- [17] Jump Online Documentation
jump - juelich multi processor.
<http://jumpdoc.fz-juelich.de/>
- [18] TOP 500 SUPERCOMPUTER SITES
<http://www.top500.org/>
- [19] PERMAS Online Manuals, (2002)
PERMAS Version 9.00.100
INTES Publication, Stuttgart.
- [20] D. Koschmieder
RAPS, Finite-Element-Postprocessor.
<http://www.fz-juelich.de/vislabs/software/raps/>